



Trimestre 19P

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA – AZCAPOTZALCO
POSGRADO EN INGENIERÍA DE PROCESOS

REUTILIZACIÓN ÓPTIMA DE AGUA DE PURGAS DE PROCESOS TÉRMICOS INDUSTRIALES MEDIANTE ALGORITMOS EVOLUTIVOS

**Tesis para obtener el grado de:
Maestra en Ingeniería de Procesos**

DULCE ITZURI VAZQUEZ SANTIAGO

Junio 2019

Asesor de Tesis:

Dr. Antonin Ponsich

Co-asesor de Tesis:

Dr. José María Ponce Ortega





Índice General

RESUMEN	6
<i>CAPÍTULO 1</i>	7
Introducción	7
1.1 Justificación	9
1.2 Hipótesis.....	10
1.3 Objetivos	11
1.3.1 Objetivo general	11
1.3.2 Objetivos específicos:.....	11
<i>CAPÍTULO 2</i>	13
Antecedentes.....	13
2.1 Procesos de purificación de agua	13
2.1.1 Suavización	14
2.1.2 Osmosis inversa	15
2.1.3 Desmineralización.....	15
2.1.4 Electrocoagulación.....	15
2.2 Integración Energética	15
2.2.1 Análisis Pinch.....	17
2.2.2 Programación matemática.....	18
2.3 Equipos de Transferencia de calor	21
2.3.1 Intercambiadores de Calor	21
2.3.1.1 Contracorriente	22
2.3.1.2 Paralelo	22
2.3.1.3 Flujo Cruzado	23
2.3.2 Caldera	23
2.4 Técnicas de Simulación	24
2.4.1 Ventajas	25
2.4.2 Paquetes de simulación	26
2.4.2.1 Aspen Plus.....	26
2.4.2.2 ProSim.....	26
2.4.2.3 CHEMCAD.....	26
2.4.2.4 Ciclo de Tiempo	27



2.4.2.5	EMSO	27
2.4.2.6	Hidro-Flujo	27
2.4.3	Trabajos relacionados	28
2.5	Técnicas de Optimización	28
2.5.1	Heurísticas	30
2.5.2	Reglas metaheurísticas.....	30
2.5.3	Algoritmos Evolutivos	31
2.5.3.1	Funcionamiento General	31
2.5.3.3	Ventajas de los Algoritmos Evolutivos	35
2.5.3.4	Estrategias Evolutivas (ES)	36
2.5.3.5	Evolución Diferencial (DE)	39
<i>CAPÍTULO 3</i>		41
Metodología		41
3.1	Descripción del proceso original y propuesta de integración	41
3.2	Estrategia general de resolución.....	44
3.3	Simulación.....	47
3.3.1	Procedimiento general	47
3.3.1.1	Estudio Adicional	48
3.3.2	Compuestos químicos y solubilidad.....	49
3.3.3	Reacciones de equilibrio.....	50
3.3.4	Modelos termodinámicos	51
3.3.4.1	Modelo electrolito NRTL (o eNRTL)	52
3.3.4.2	Modelo electrolítico en Aspen Plus	53
3.3.5	Operaciones Unitarias involucradas	54
3.3.6	Bloques utilizados en Aspen Plus	55
3.3.6.1	SOFTENER (Suavizador)	55
3.3.6.2	HE1 (Intercambiador de calor de carcasa y tubos).....	56
3.3.6.3	PHEATER (Pre calentador de agua).....	57
3.3.6.4	Caldera.....	57
a)	BOILER	57
b)	FBOILER (Equipo separador de fases adaptado a la caldera).....	58
3.3.6.5	PROCESS	58



3.3.7	Módulo Especificaciones de Diseño (SPEC).....	59
3.4	Optimización	61
3.4.1	Variables de decisión	61
3.4.2	Definición del Problema de optimización	62
3.4.3	Escenarios.....	64
3.5	Implementación de los algoritmos de resolución.....	64
3.6	Interfaz utilizada	65
3.6.1	Excel - Visual Basic for Application (VBA)	66
3.6.2	Aspen Plus – Excel - VBA	67
<i>CAPÍTULO 4</i>		67
Ajuste de parámetros		67
4.1.1	Estrategias evolutivas.....	68
4.1.2	Evolución Diferencial	70
4.2	Resultados con Estrategias Evolutivas para los diferentes escenarios.....	72
a)	Escenario 1 ($Q_{process} = 2.5 \text{ Gcal/h}$)	72
b)	Escenario 2 ($Q_{process} = 4.5 \text{ Gcal/h}$)	77
c)	Escenario 3 ($Q_{process} = 6.5 \text{ Gcal/h}$)	79
4.3	Resultados con Evolución Diferencial para los diferentes escenarios.....	81
a)	Escenario 1 ($Q_{process} = 2.5 \text{ Gcal/h}$)	81
b)	Escenario 2 ($Q_{process} = 4.5 \text{ Gcal/h}$)	81
c)	Escenario 3 ($Q_{process} = 6.5 \text{ Gcal/h}$)	82
4.4	Resultados comparativos entre Estrategias evolutivas y Evolución Diferencial para los diferentes escenarios.....	82
<i>CAPÍTULO 5</i>		84
Anexo 1		86
Anexo 2		88
Anexo 3		89
Anexo 4		91
Anexo 5		96
a)	Códigos en Matlab	96
b)	Código en VBA.....	101
1.	Bibliografía.....	102



Lista de figuras

Figura 1. Diferentes métodos de purificación del agua.....	14
Figura 2. Intercambiador de calor de carcasa y tubos [10]	21
Figura 3. Intercambiador de calor de carcasa y tubo a contracorriente [28].	22
Figura 4. Intercambiador de calor de doble tubo [28].	22
Figura 5. Intercambiador de calor de flujo cruzado [46].	23
Figura 6. Pseudocódigo de funcionamiento de un AE [12].	32
Figura 7. Diagrama de funcionamiento de los AEs [8].	33
Figura 8. Proceso general de producción de vapor	42
Figura 9. Modelo para la simulación en Aspen Plus V9.1 de un proceso térmico industrial usado para la reutilización térmica de purga de caldera.	44
Figura 10. Interfaz entre un simulador de proceso (Aspen Plus) y Excel (contiene un programa de optimización) [5]	46
Figura 11. Diagrama representando la estrategia de resolución [55].	46
Figura 12. Componentes de las reacciones electrolíticas.	47
Figura 13. Selección de método termodinámico de trabajo	48
Figura 14. Propiedades bloque HE1	56
Figura 15. Características equipo pre calentador de agua	57
Figura 16. Especificaciones de la caldera	58
Figura 17. Descripción del bloque FBOILER	58
Figura 18. Configuración del bloque PROCESS	59
Figura 19. Módulo Especificaciones de Diseño para asegurar líquido saturado en la corriente CONDENSE.	60
Figura 20. Módulo especificación de diseño para el cálculo del calor requerido en PHEATER	61
Figura 21. Mejor resultado de acuerdo al ajuste de parámetros	70
Figura 22. Mejor resultado de acuerdo al ajuste de parámetros para ED	72
Figura 23. Resultados de las especificaciones de diseño	74
Figura 24. Resultados para el intercambiador de calor HE1	74
Figura 25. Componentes en moles de la corriente SATWATER	75
Figura 26. Componentes de la corriente SATWATER	76
Figura 27. Resultados para el bloque PHEATER	76
Figura 28. Resultados de las especificaciones de diseño para el escenario 2 de demanda de calor. .	77
Figura 29. Resultados de las especificaciones de diseño para la alimentación a proceso, escenario 2	77
Figura 30. Resultados del segundo caso con el algoritmo de ES	78
Figura 31. Resultados de especificaciones de diseño para escenario 3 de demanda de calor	79
Figura 32. Resultados de las especificaciones de diseño para la alimentación a proceso, escenario 3	79
Figura 33. Resultados del tercer caso para el algoritmo de ES	80
Figura 34. A la izquierda resultados del caso 1 y a la derecha gráfico del caso 2 sección 4.1	88
Figura 35. A la izquierda resultados del caso 3 y a la derecha gráfico del caso 4 sección 4.1	88
Figura 36. Resultados para 30 generaciones, tamaño de población de 5 a la izquierda parámetro de cruza y factor F de 0.7, a la derecha parámetro de cruza y factor F de 0.9	89
Figura 37. Resultados para 15 generaciones, tamaño de población de 10 a la izquierda parámetro de cruza y factor F de 0.7, a la derecha parámetro de cruza y factor F de 0.9	89



Figura 38. Resultados del análisis de sensibilidad	93
Figura 39. Análisis de sensibilidad respecto a la temperatura de los condensados	94
Figura 40. Analisis de sensibilidad variando el flujo de alimentación	96

Lista de tablas

Tabla 1. Componentes considerados en el proceso	49
Tabla 2. Composiciones y solubilidad de sales utilizadas en el proceso descrito	50
Tabla 3. Reacciones de Equilibrio	50
Tabla 4. Composición de alimentación del modelo de simulación	54
Tabla 5. Definición de corrientes y equipos mostrados en la figura 9.	55
Tabla 6. Fracciones de separación para el suavizador	56
Tabla 7. Ajuste de parámetros para 10 corridas con 150 generaciones	68
Tabla 8. Valores de las variables de decisión de acuerdo al ajuste de parámetros	69
Tabla 9. Ajuste de parámetros para algoritmo de ED	70
Tabla 10. Resultados que toman las variables de decisión en un algoritmo de ED	71
Tabla 11. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones	73
Tabla 12. Resultados obtenidos en Aspen Plus para la mejor solución	73
Tabla 13. Parámetros resultantes de la simulación correspondientes al Tanque Flash	74
Tabla 14. Características de las corrientes de vapor a proceso y agua purgada	75
<i>Tabla 15. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones</i>	<i>77</i>
Tabla 16. Resultados obtenidos en Aspen Plus para la mejor solución	78
<i>Tabla 17. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones</i>	<i>79</i>
Tabla 18. Resultados obtenidos en Aspen Plus para la mejor solución	80
<i>Tabla 11. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones</i>	<i>81</i>
Tabla 20. Resultados obtenidos en Aspen Plus para la mejor solución	81
<i>Tabla 21. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones</i>	<i>82</i>
<i>Tabla 22. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones</i>	<i>82</i>
Tabla 23. Tabla comparativa con las mejores soluciones encontradas por ambos Algoritmos Evolutivos	82
Tabla 20. Resultados comparativos entre algoritmos ED y ES, costos y desviación estándar	83

RESUMEN

En este proyecto se presenta un nuevo enfoque para la reutilización óptima de agua de purgas procedente de equipos térmicos industriales, mediante el aprovechamiento energético de las mismas. Esta estrategia de integración energética es introducida a través de la implementación de una estructura que representa la red de intercambio de calor en un proceso de producción de embutidos.

La mayoría de estudios han considerado trabajar la integración térmica mediante una superestructura de los flujos y posibles intercambios y optimizan posteriormente el modelo resultante mediante herramientas de Programación Matemática. Al contrario, en este proyecto, el proceso de interés es formulado como un modelo de simulación asistido por el paquete computacional Aspen Plus. Este modelo incluye el equipo necesario para la reutilización de la energía térmica del agua de purgas del proceso térmico considerando sus respectivos parámetros de operación, así como las reacciones químicas correspondientes.

En base a este modelo, se define un problema de optimización que toma en cuenta una función objetivo relacionada con la minimización de los costos totales anuales, que toman en cuenta el costo de inversión del equipo de intercambio de calor nuevo, así como los costos de operación de los calentadores formando parte del proceso. Las variables de decisión las constituyen las condiciones operativas del intercambiador de calor incluido en el modelo creado.

Debido a sus características, el problema de optimización correspondiente es resuelto mediante técnicas metaheurísticas, fáciles de adaptar cuando sólo se dispone de una simulación como evaluación de la función objetivo. En este caso, dos Algoritmos Evolutivos, Estrategias Evolutivas y Evolución Diferencial, fueron elegidos e implementados en Matlab. La relación entre el simulador y el optimizador se efectúa mediante una interfaz en Excel-VBA, que permite tratar e interpretar los flujos de información de cada módulo.

Los experimentos computacionales realizados sobre este ejemplo demuestran la relevancia de la propuesta, ya que confirman la justificación económica de colocar un intercambiador nuevo, con un área lejos de ser despreciable y provocando una disminución de los costos totales anuales del proceso considerado.



CAPÍTULO 1

Introducción

En los últimos años se ha realizado una búsqueda profunda de métodos eficientes para optimizar procesos térmicos capaces de recuperar mayores cantidades de agua con menor uso de combustibles, permitiendo alargar la vida útil de los equipos térmicos (principalmente calderas, chillers, torres de enfriamiento y condensadores evaporativos). Estas estrategias involucran no sólo el desarrollo de métodos para la optimización de redes de agua de proceso, sino también abordan el aspecto de la recuperación de las aguas de purga.

Es bien sabido que el vapor producido por una caldera puede tener diversos usos, algunos de ellos son: vapor motriz y vapor de calentamiento (este proyecto se enfoca en el segundo caso). Una vez que el vapor cede todo su calor latente, el agua caliente (condensados) puede ser utilizada para calentamiento de algunos equipos que requieren precalentar algún proceso, muchas veces esta agua es retornada al tanque de alimentación a calderas. El agua de purga de dichos equipos suele ser purgada continuamente, mientras que se mantiene caliente (aproximadamente a 90°C) y solo contiene compuestos inorgánicos. Por lo tanto, es posible su reutilización, sacando provecho del calor sensible que contiene y colocando nuevos intercambiadores de calor de carcasa y tubos.

Es importante mencionar que la eficiencia con la que operan las calderas de vapor, y por consiguiente el costo de operación de éstas, así como la seguridad en su operación y durabilidad, depende en gran medida de la calidad del agua con la que se alimentan [54]. Además, la calidad del agua de alimentación requerida por los equipos térmicos depende principalmente de la presión a la que operan y de su diseño. Por este motivo, el agua de alimentación a calderas debe ser de alta pureza, lo cual implica no sólo un tratamiento mecánico sino también un tratamiento químico mediante la adición de productos capaces de hacer reaccionar los compuestos presentes en el agua y, de esta manera, precipitar sus sales contenidas. Sin embargo, este tratamiento reduce la eficiencia de los procesos térmicos, ya que una vez que se precipitan estos sólidos, tienen un número limitado de ciclos de concentración, por lo que se tienen que eliminar mediante purgado [21].

Los compuestos más comunes mezclados con el agua de alimentación y purga son; bicarbonatos y carbonatos de calcio y magnesio, hidróxidos de calcio y magnesio, silicato de magnesio, varias formas de óxido de hierro y sílice. De no eliminarse dichas sales del agua, se forman depósitos en forma de incrustación

(costra dura), producidos mayormente por las sales de calcio y magnesio que se adhieren en las superficies metálicas de los fluxes (haz de tubos internos) de los equipos térmicos, principalmente en las calderas. Estos depósitos, por su carácter aislante, afectan la transferencia de calor al agua, reduciendo la eficiencia de la caldera y del proceso, provocando sobrecalentamiento de los tubos con el peligro de deformaciones o roturas de los mismos. Los procesos más utilizados para la eliminación de las sales presentes en el agua son; suavización, desmineralización, osmosis inversa entre otros [37].

Así, en este proyecto se pretende utilizar el agua caliente de purgas de calderas, aprovechando su energía térmica para precalentar algún fluido. Cabe mencionar que los intercambiadores tienen que ser de acero inoxidable o algún material capaz de soportar las incrustaciones de las sales contenidas en la purga, o bien estar preparados para su limpieza continua.

De acuerdo a lo anterior, el presente proyecto aborda el problema de diseño de procesos de recuperación energética y aprovechamiento térmico, así como la determinación de las características óptimas de estos equipos, de acuerdo a la cantidad de agua purgada. El estudio de la viabilidad de esta estrategia de integración energética se realiza a través de la minimización del costo total del nuevo proceso, considerando la operación de los equipos térmicos y la inversión asociada a los equipos nuevos, introducidos en la etapa de diseño.

La estrategia general de resolución se constituye, en la ingeniería de procesos, por tres etapas: síntesis de procesos, simulación de procesos y optimización.

- **Síntesis de procesos.** Es la etapa en la cual se crea la estructura básica del diagrama de flujos representando el proceso. Se seleccionan los equipos a utilizar, sus interconexiones, y se establecen los valores iniciales de las condiciones de operación [33].
- **Simulación de procesos.** Etapa en la cual se requiere solucionar balances de materia y energía para un proceso en estado estacionario y efectuar una evaluación económica preliminar del proceso [33].
- **La optimización.** Se aprovecha la estructura creada en la simulación para determinar el mejor diseño, o bien las mejores condiciones de operación, que maximicen (o minimicen) una función especificada por el usuario (función objetivo) [5]. Esta función objetivo expresa un criterio técnico-económico de evaluación del proceso.

1.1 Justificación

Recientemente, la industria de procesos químicos ha sufrido importantes cambios debido al aumento del costo de energía y a la creciente exigencia de regulaciones ambientales [5]. El agua es una de las materias primas más utilizadas en las industrias químicas y petroleras, se requieren grandes cantidades de agua en los procesos de generación de vapor (calderas) y energía, así como de fabricación y enfriamiento. Además, también se utiliza para limpieza de equipos, extinción de incendios y otros consumos diversos. Después de estos usos se generan inevitablemente aguas residuales, éstas usualmente se procesan en unidades de tratamiento antes de su descarga al medio ambiente [20].

Aunque el agua es una de las muchas fuentes naturales abundantes en la tierra, su demanda se ha incrementado dramáticamente en la actualidad debido al rápido desarrollo observado en muchas regiones del mundo. Por consiguiente, existen incentivos reales para desarrollar metodologías de integración de procesos, con un especial énfasis en la conservación del agua [16]. En favor de metodologías verdes, se buscan enfoques para minimizar el consumo de agua en las industrias. Sin embargo, son escasos los trabajos centrados en la recuperación del agua de purgas a través de la determinación de la cantidad óptima de purgado dado un conjunto de corrientes de proceso calientes con diferentes caudales de flujo y temperatura.

Las corrientes de agua deben de ser calentadas para satisfacer los requisitos de temperatura de las operaciones unitarias y el consumo de energía se vuelve necesario para estas tareas de calentamiento. Bajo estas circunstancias, la energía y el agua necesitan ser consideradas simultáneamente. Este problema fue abordado primeramente por Savulescu y retomado por Ataei et al. [11].

Continuando con este enfoque y para reducir el costo de los procesos químicos de tratamiento de agua, se pueden desarrollar procedimientos de optimización que buscan determinar el mejor diseño posible de la planta y las condiciones de operación correspondientes [5]. Por ejemplo, las aguas residuales en la industria química se pueden minimizar mediante la reutilización del agua, aspecto abordado por Prakotpol et al. [17] a través del desarrollo de un algoritmo genético que minimiza el costo de tratamiento de las aguas residuales, sistema representado con un modelo no lineal entero mixto (MINLP) [17].

Además, en los últimos años, diferentes enfoques de optimización que incluyen aspectos económicos y ambientales han sido propuestos para resolver diferentes problemas relacionados con la recuperación de agua. Por ejemplo, Bagajewicz y Bogataj [37] presentan la formulación de un modelo no lineal novedoso para obtener los máximos ahorros económicos.

Otros estudios de optimización de sistemas de agua han sido basados en el Análisis Pinch o en programación matemática y se concentran en determinar las condiciones de operación adecuadas para los sistemas de distribución de agua en plantas (estableciendo cotas máximas sobre las concentraciones de salida de las unidades que utilizan agua) [55].

Luo y Uan [58] presentan un método basado en una superestructura para la optimización de los sistemas integrados de agua. El optimizador que utilizan es un algoritmo metaheurístico de optimización por Enjambre de Partículas, al cual se agrega un procedimiento de búsqueda basado en la solución sucesiva de un programa lineal. Al contrario, Doyle y Smith [18] propusieron un método basado en un programa no lineal para lograr la máxima reutilización del agua en los sistemas de procesamiento [20].

Kokossis y Smith [2] abordan el diseño de un sistema de agua industrial, que hace un uso más eficiente de los recursos hídricos disponibles a través de la integración energética, mejorando la eficiencia del sistema mediante la reutilización o regeneración de agua previa para reutilizar, o regenerar y reciclar. Este enfoque se basa en un análisis pinch junto con potentes herramientas de programación matemática, para encontrar una red que minimice el costo total anualizado [2].

A su vez, Verhoef et al. [6] exploraron la posibilidad de simular un proceso térmico con la ayuda de Aspen Plus y Excel Visual Basic para Aplicaciones (VBA), dando como resultado una simulación híbrida. Realizan estudios de casos, en los que se simulan procesos de destilación y evaporación. Los resultados que presentan justifican el valor de este software como una herramienta de diseño [6].

Así pues, los trabajos citados permiten comprobar el gran interés dedicado a la estrategia de integración térmica, denotando sin embargo que la reutilización de agua de purgas es un tema poco desarrollado. Por otro lado, aunque sólo se ha utilizado marginalmente, el trabajo de Verhoef et al. [6] demuestra que la simulación puede constituir una herramienta eficaz de representación de los procesos térmicos considerados. Estos diferentes estudios justifican la metodología propuesta en este trabajo, formulada en la hipótesis de investigación que se presenta a continuación.

1.2 Hipótesis

Se considera viable en el marco de este proyecto que, a mayor saturación de sales del agua, éstas sedimentarán mayormente. Al separarlas del agua, se puede recuperar esta última y utilizarla como alimentación a procesos térmicos, así como

para baños, lavado de pisos y pipas, etc. La energía térmica que contienen las purgas de calderas puede ser recuperada mediante la colocación de intercambiadores de calor, los cuales realicen la función de un economizador.

Además, es posible formular el problema antes descrito de reutilización del agua de equipos térmicos interconectados en serie a diferentes temperaturas como un modelo de simulación, mediante una estructura incluyendo los elementos constitutivos del proceso e integrando las ecuaciones de balance de masa y energía para el agua. Finalmente, se considera que el modelo de simulación resultante puede ser optimizado gracias a una técnica metaheurística, con tal de mejorar criterios de naturaleza técnico-económica y/o medio-ambiental.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo general

Desarrollar un proceso de recuperación de agua de purgas para procesos térmicos industriales, mediante simulación y optimización por una técnica metaheurística.

1.3.2 Objetivos específicos:

1. Modelar un sistema de reutilización de agua de purgas de procesos térmicos, utilizada en calderas. Se integrarán aspectos relacionados con recuperación de energía térmica de las purgas de calderas.
2. Modelar una estructura general del proceso térmico de recuperación de calor en ASPEN Plus.
3. Simular el funcionamiento del proceso térmico de recuperación en ASPEN Plus.
4. Identificar los parámetros de proceso que serán usados como variables de decisión y los que constituirán los objetivos del problema de optimización. Se considera por ejemplo minimizar costos maximizando el uso de energía.
5. Implementar al menos un algoritmo evolutivo cuya entrada será la función objetivo del problema (definida en el paso anterior) y sus salidas serán las variables de optimización (la simulación con ASPEN Plus sirve para evaluar el objetivo).



6. Evaluar la robustez del proceso diseñado, frente a diferentes factores no controlables, mediante la generación de diferentes escenarios variando condiciones de operación (eficiencia del suavizador, demanda de calor requerido por el proceso y calidad del agua de alimentación al proceso).

El resto del documento se organiza como se indica a continuación. En el Capítulo 2, se presentan los antecedentes del proyecto. En el Capítulo 3, se proporciona la metodología de resolución propuesta, la descripción de los bloques utilizados, los compuestos y reacciones consideradas, mientras que en el Capítulo 4 se presentan el ajuste de parámetros de operación de los algoritmos implementados y los resultados gráficos y numéricos obtenidos. Algunas conclusiones y perspectivas para trabajo futuro se proponen en el Capítulo 5, así como al final de este documento encontrará un anexo con los resultados del ajuste de parámetros, un glosario y finalmente la bibliografía utilizada en este proyecto.



CAPÍTULO 2

Antecedentes

Este capítulo presenta conceptos básicos relacionados con los diferentes elementos que constituyen el presente proyecto, así como trabajos relacionados, publicados anteriormente. Como se comentó en la introducción, la estrategia de integración energética requiere de trabajar con un agua lo más libre de sales formadoras de dureza posible, para evitar incrustaciones en los tubos internos de los equipos de intercambio de calor utilizados. Por lo tanto, primeramente se describen algunos procesos de purificación de agua. Luego se presentan los conceptos generales de integración energética, dando un especial énfasis en el análisis Pinch y las técnicas de Programación Matemática, para posteriormente describir los equipos comúnmente utilizados para realizar la transferencia de calor. Posteriormente, la sección 2.4 proporciona generalidades sobre la simulación de procesos y establece la relación entre esta área y el tema de este proyecto. Finalmente, el resto del capítulo se dedica a presentar conceptos básicos de optimización, así como definir de manera detallada algunos Algoritmos Evolutivos que serán de mayor relevancia para el desarrollo de este trabajo.

2.1 Procesos de purificación de agua

Para garantizar una mayor eficiencia de los equipos térmicos utilizados en las industrias, el agua con que se alimentan debe de ser de alta calidad, libre de sales ya que estas provocan incrustación en los tubos internos de los equipos térmicos (principalmente sales de sílice y carbonatos de calcio y magnesio). Para eliminar estas sales se puede recurrir a diferentes tipos de procesos, descritos en Figura 1.

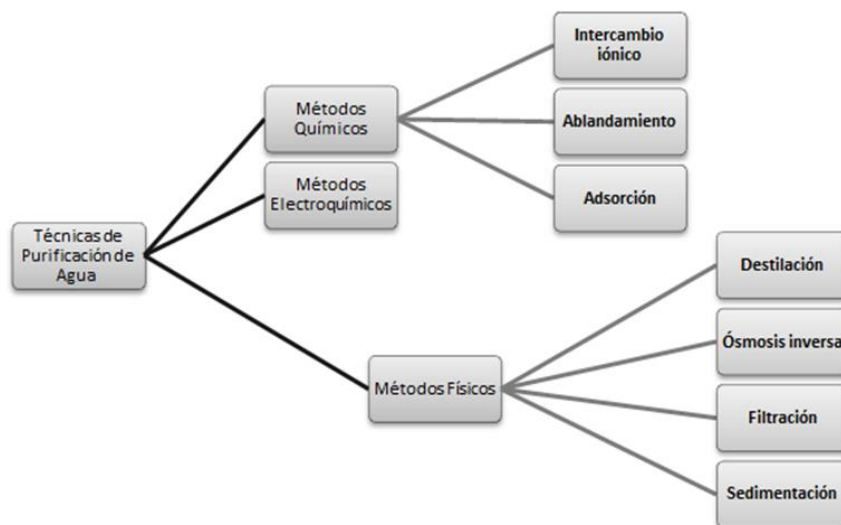
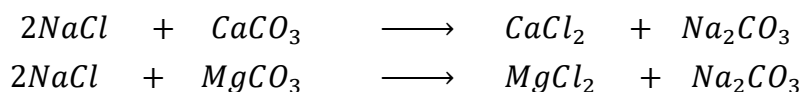


Figura 1. Diferentes métodos de purificación del agua.

El proceso de intercambio iónico puede llevarse a cabo mediante desmineralización o mediante suavización, pero debido a su bajo costo, al menor desperdicio de agua y a la facilidad de operación, las industrias químicas mayormente emplean la suavización como medio de purificación de agua. Este proceso puede ser aislado o acompañado de desmineralización u ósmosis inversa. El método de suavización se ocupará en el marco del presente proyecto, y es descrito en la sección 2.1.1. Sin embargo en las secciones 2.1.2 a 2.1.4 se describen las principales técnicas de eliminación de sales del agua.

2.1.1 Suavización

La función de los ablandadores es intercambiar los iones Ca^{+2} , Co^{+2} , Cu^{+2} , Mg^{+2} , Fe^{+2} y Mn^{+2} que conforman la dureza del agua y favorecen la formación de incrustaciones en una caldera por iones sodio Na, normalmente presentes en el agua. Como resultado de este proceso, se incrementa la concentración de sodio en el agua tratada a través de las siguientes reacciones:



Una desventaja de este proceso la constituye la formación de precipitados cálcicos debida a la presencia de oxígeno. Estos precipitados bloquean los sitios de intercambio iónico, causando la saturación de la resina [21]. A comparación con la desmineralización, este proceso sólo ocupa resinas catiónicas. El tratamiento sólo elimina la dureza mas no los sólidos disueltos totales (SDT). La regeneración de la resina catiónica se realiza con una disolución de Cloruro de sodio (NaCl) [19].

2.1.2 Osmosis inversa

Es un proceso físico de filtración para separar sales principalmente sólidos disueltos y sílice, en el que las sales se eliminan por medio de flujo impulsado por presión a través de una membrana semipermeable (de porosidad específica). Esta presión es mayor a la presión osmótica de la solución. Estas especies químicas son transportadas fuera de la membrana por una corriente de agua denominada rechazo, mientras que el agua libre de sales que atraviesa la membrana recibe el nombre de permeado [13].

2.1.3 Desmineralización

Este proceso se basa en la remoción de aniones o cationes de compuestos específicos disueltos en el agua, a través de su reemplazo por aniones o cationes provenientes de un medio de intercambio, con el que se pone en contacto. Se lleva a cabo usando resinas de intercambio iónico y se puede eliminar el 100% de las sales contenidos en el agua, pero no compuestos orgánicos. Estas resinas, al saturarse, se regeneran con un ácido y una sustancia cáustica [19].

2.1.4 Electrocoagulación

La electrocoagulación (EC) es un proceso eficiente para el acondicionamiento de aguas con alto contenido de sílice. Se lleva a cabo en un reactor abierto de flujo ascendente y electrodos de aluminio. Este proceso suele acompañarse de una unidad de clarificación y filtración [19].

2.2 Integración Energética

Uno de los problemas más frecuentes en las plantas industriales es el consumo de energía, el cual representa una de las contribuciones más importantes al costo global de la industria (aproximadamente 30%). Aunque los sistemas de recuperación de calor se estudian con frecuencia en problemas de síntesis, se prestó gran atención a estos después de la primera crisis mundial energética, durante los años setenta. Por lo tanto, se ha incrementado el estudio de alternativas para minimizar el consumo de energía [34].

La integración energética es una de las dos categorías más importantes de la integración de procesos además de la integración másica. La integración energética se ocupa del estudio del flujo global de energía (generación e intercambio global de energía) dentro de cualquier proceso e identifica las

condiciones óptimas para su distribución (y redistribución), buscando la configuración óptima para el consumo mínimo de la misma [49].

Esta estrategia se ha convertido en una herramienta muy útil para disminuir los consumos de energía, agua, recursos y para la reducción de costos. Está basada en la creación de una estructura de la red térmica. Para implementar y resolver problemas de integración energética se usan típicamente herramientas analíticas avanzadas, como análisis Pinch y técnicas de programación matemática [59].

En los procesos industriales, hay corrientes que necesitan calefacción y corrientes que necesitan refrigeración. La síntesis de la red de intercambiadores de calor (HEN, por las siglas en inglés de "Heat Exchanger Network") es un medio para aprovechar las características energéticas de flujos de calor para calentar corrientes frías y para enfriar corrientes calientes [34]. Una HEN es una red que consta de uno o más intercambiadores de calor que ponen en contacto estos diferentes flujos y, además, deben de satisfacer la conservación de energía [49].

La integración energética trata con todas las formas de energía como la calefacción, refrigeración, generación/consumo de energía, presurización/despresurización y combustible. Para un sistema dado, la síntesis de HEN responde las siguientes preguntas: ¿Qué servicios de calefacción / refrigeración deberían emplearse?, ¿Cuál es la carga de calor óptima que debe eliminarse/agregarse por cada unidad?, ¿Cómo deben coincidir las corrientes de calor y frío (combinaciones de flujo)? y ¿Cuál es la configuración óptima del sistema? Esta optimalidad se establece normalmente en base a conceptos económicos (costo anualizado por ejemplo), aunque también se puede relacionar con criterios ambientales, topológicos o sociales. Numerosos métodos han sido desarrollados para la síntesis de HEN. Estos métodos han sido revisados por Linnhoff, Shenoy, Douglas, Gundersen y Naess [49].

Estos métodos de resolución tienen como objetivo encontrar la configuración óptima de la red, suelen componerse de dos etapas: la primera consiste en determinar la demanda de utilidad mínima, el número mínimo de equipos de transferencia de calor, el área mínima de transferencia de calor y el mínimo costo anual global. Sin embargo, la satisfacción de estas características implica encontrar un HEN con el mínimo consumo de utilidades, a una temperatura media logarítmica mínima dada (DT_{min}). En donde esta DT_{min} analiza la temperatura del fluido frío y del fluido caliente; teniendo como un máximo de temperatura, la temperatura del fluido caliente y como un mínimo la del fluido frío.

Esta etapa se conoce como pre-análisis. Para lograr este objetivo, es necesario encontrar el DT_{min} óptimo para cada caso en estudio. Durante la segunda etapa,

se asignan intercambiadores de calor y se encuentra la secuencia práctica entre el equipo, apuntando los objetivos fijados en el primer escenario [34].

Cabe mencionar que, recientemente, los métodos heurísticos de optimización también se han utilizado para resolver problemas de síntesis de HEN. Efectivamente, dado que de la gran complejidad del problema nace su naturaleza combinatoria, las técnicas heurísticas permiten encontrar soluciones de buena calidad en un tiempo computacional razonable. Para un número fijo de secuencias, hay un gran número de posibilidades de combinaciones.

En el marco de este proyecto, el estudio se concentra en una estrategia alterna que es la simulación de procesos combinada con una optimización utilizando técnicas heurísticas, sobre el caso de la recuperación energética. Sin embargo, es importante recalcar que en una mayoría de trabajos, la integración energética se aborda a través del análisis pinch o la programación matemática (optimización), estos métodos se describen a continuación.

2.2.1 Análisis Pinch

El análisis Pinch ha sido aplicado exitosamente tanto como para estudios de integración energética como para integración másica, en la que regularmente se trata de minimizar el consumo de agua fresca en un proceso, mediante el reúso y el reciclado del agua utilizada en diferentes operaciones del mismo. En vista de los crecientes costos del agua y las estrictas regulaciones de descarga, el análisis pinch ayuda a las empresas a minimizar sistemáticamente los volúmenes de agua dulce y de aguas residuales, o bien garantizar costos mínimos de energía y capital, generando una variedad de diseños alternativos de red de calor. Toma en cuenta, además, la satisfacción de un conjunto de especificaciones dadas que dependen de la naturaleza del problema tratado (requisitos sobre la concentración de contaminantes, o sobre la temperatura de algunos flujos) [47].

Este análisis indica además las posiciones que deberán tener los equipos para evitar pérdidas de energía. Algunos de las aplicaciones del análisis pinch son: efecto de la caída de presión y optimización, perfiles de columna de destilación, el diseño de procesos, integración de procesos, minimización del agua y aguas residuales y el planteamiento de emisiones de la planta [38].

En el caso de la integración energética, para obtener una red de intercambio de calor óptima usando el análisis pinch, se deben seguir tres pasos. El primero consiste en encontrar la demanda de energía mínima, la cantidad mínima de intercambiadores de calor y el mínimo costo anual global. El segundo paso consiste en la síntesis de la red de intercambiadores de calor, o la definición de las

corrientes que deben intercambiar calor, así como la mejor secuencia de los equipos, para lograr los objetivos definidos en la primera etapa. En el tercer paso, la red se desarrolla identificando y rompiendo bucles [34].

Una de las ventajas clave de la tecnología pinch sobre los métodos de diseño convencionales es la capacidad de establecer un objetivo de energía para el diseño, utilizando un esquema de integración de calor, haciendo coincidir las corrientes de proceso frío y caliente con una red de intercambiadores para que las demandas de servicios suministrados externamente se reduzcan al mínimo.

La tecnología Pinch establece una diferencia de temperatura, designada como punto pinch, que separa la región de temperatura de funcionamiento general observada en el proceso en dos regiones de temperatura. Una vez que se ha establecido el punto pinch el calor de las fuentes externas debe suministrarse al proceso solo a temperaturas superiores al punto pinch y retirarse del proceso mediante medios de enfriamiento solo a temperaturas inferiores a dicho punto. Tal metodología maximizará la recuperación de calor en el proceso con el establecimiento de una red de intercambio de calor, dando como resultado una compensación entre la energía recuperada y los costos de capital involucrados en esta recuperación de energía.

El punto de partida para un análisis pinch consiste en identificar en el proceso de interés todas las corrientes de proceso que deben calentarse y todas aquellas que deben enfriarse. Esto significa identificar las corrientes, sus tasas de flujo y propiedades térmicas, sus posibles cambios de fase y los rangos de temperatura dentro de los cuales debe ser calentada o enfriada. La tasa de cambio de entalpía para cada flujo se obtiene de la ecuación 1.

$$\Delta\dot{H} = \dot{m}C_p\Delta T = CP\Delta T \quad (1)$$

Donde ΔH es la tasa de cambio de entalpía, m el caudal másico, C_p la capacidad calorífica, ΔT el cambio de temperatura en la corriente, y CP la tasa de capacidad de calor definida como el producto mC_p . Los valores resultantes permiten trazar una curva de temperatura frente a la tasa de entalpía. La misma información y procedimientos se siguen para desarrollar una curva compuesta de las corrientes a enfriar [50].

2.2.2 Programación matemática

La alternativa clásica al análisis pinch es la programación matemática. La programación matemática es una clase de potentes técnicas de optimización, utilizada en el proceso de toma de decisiones de numerosas organizaciones para

resolver problemas de optimización lineal o no lineal, con variables de decisión continuas (programación lineal) y/o discretas (programación entera) [25].

El problema la programación matemática consiste en elegir aquel o aquellos valores de las variables pertenecientes al conjunto de oportunidades en el espacio de búsqueda, es decir, variables que proporcionan el mayor o menor valor de la función objetivo enfocándose en el diseño y la síntesis de procesos.

Los métodos de programación matemática requieren en primer lugar del establecimiento de un modelo en forma algebraica, representando el problema de optimización de interés. El planteamiento general de un modelo de programación matemática se presenta en la ecuación 2.

$$\begin{aligned} \min Z &= f(x, y) \\ \text{s. t.} \quad &h(x, y) = 0 \\ &g(x, y) \leq 0 \\ &x \in X, y \in \{0,1\} \end{aligned} \tag{2}$$

Donde $f(x, y)$ es la función objetivo, $h(x,y)=0$ es un conjunto de restricciones de igualdad que describen el funcionamiento del sistema (balances de calor y masa, ecuaciones de diseño, etc.), mientras que $g(x,y)\leq 0$ son restricciones de desigualdad que definen en general cotas a respetar sobre algunas variables. Las variables x son continuas y generalmente corresponden a las variables de operación (caudal de flujos, temperaturas, etc.) mientras que las variables discretas y , generalmente restringidas para tomar valores de 0-1, se relacionan con el diseño del sistema (existencia de una unidad, de un flujo, etc.). El problema descrito en la ecuación 2 corresponde a un programa no lineal entero mixto (MINLP) cuando cualquiera de las funciones involucradas (f , g o h) es no lineal. Si todas las funciones son lineales, entonces el modelo corresponde a un programa lineal entero mixto (MILP). Si todas las variables son continuas (no hay variable y), entonces el problema se reduce a un programa no lineal (NLP) o lineal (LP) dependiendo de las características de las funciones del modelo.

En la aplicación de técnicas de programación matemática para problemas de diseño y síntesis, siempre es necesario postular una superestructura de las alternativas de la red térmica. Hay dos problemas principales que surgen en este paso. El primero es, dado un conjunto de alternativas que deben analizarse, ¿cuáles son los principales tipos de representaciones que se puede usar, y cuáles son las implicaciones para el modelado? El segundo es, para una representación seleccionada, ¿cuáles son todas las alternativas factibles que deben incluirse para garantizar que el óptimo global no se pase por alto? [40].

Los métodos basados en programación matemática generalmente incluyen tres pasos: construir una superestructura incluyendo todas las interconexiones posibles, formular el modelo matemático correspondiente, y aplicar o desarrollar estrategias de solución para el problema de optimización resultantes.

Los beneficios de utilizar enfoques de programación matemática son múltiples, debido a su confiabilidad (garantizan la obtención de una solución al menos localmente óptima) y al hecho de que pueden resolver problemas de diseño de gran tamaño de manera eficiente. Es además versátil, porque el programa matemático propuesto puede ser fácilmente adaptado para una amplia gama de diseños y de aplicaciones [69]. Sin embargo, cabe mencionar que generalmente es muy complejo formular una superestructura precisa y resolver los modelos establecidos. Además, el proceso de resolución es, a diferencia de la integración de procesos, una operación de "caja negra", que puede causar soluciones deficientes en ingeniería y que requiere en general de la determinación de una solución inicial de buena calidad [7].

Uno de los trabajos de integración energética basado en programación matemática lo presenta Grossmann et. al. [40]. Los autores abordan problemas de diseño y síntesis de procesos a través de la formulación de superestructuras y modelos que resultan en la formulación de problemas de tipo MINLP. Los autores proponen estrategias específicas de solución, aplicando su estrategia a la síntesis de redes de reactores, secuencias de destilación, redes de intercambiadores de calor, intercambiador de masas redes, y plantas de servicios públicos [40].

Además los métodos de programación matemática son ampliamente utilizados para la integración másica de redes de agua con múltiples contaminantes. El método de programación matemática se utilizó inicialmente para optimizar la red de agua por Takama et al. (1980), pero no recibió atención hasta que Doyle y Smith en 1997 presentaron un procedimiento en el que los valores iniciales para la programación no lineal (NLP) proporcionaban un modelo lineal (LP). Khor et al. (2012), usaron optimización global involucrando cortes lógicos utilizando el software BARON, y posteriormente Khor et al. (2014) propusieron una revisión de investigaciones representativas centrándose en los métodos de programación matemática para la síntesis de redes de agua continuas y de un solo sitio.

Poplewski (2015) presentó un modelo para optimizar la reutilización de redes de agua con incertidumbres sobre ciertos datos y desarrolló una estrategia de resolución de varios pasos basada en el teorema de la esquina de puntos. Mientras que Rubio-Castro et al. (2016) establecieron una superestructura para optimizar las redes de agua de agricultura y formularon el problema como uno de tipo MINLP. Cabe mencionar que, en este estudio, se buscaba optimizar

simultáneamente beneficios económicos, ambientales y sociales [7], mediante una estrategia de optimización multi-objetivo conocida como restricciones- ϵ .

En este trabajo, dado el enfoque propuesto basado en simulación, no se tendrá un modelo matemático explícito del sistema, por lo que se explora una estrategia alterna de optimización, mediante técnicas metaheurísticas.

2.3 Equipos de Transferencia de calor

Los aspectos de integración energética fueron descritos en las secciones anteriores desde un punto de vista teórico y estratégico. Su implementación, dentro de las fábricas, implica la realización de intercambios de calor entre diferentes flujos. Esta sección presenta, desde un punto de vista práctico, los equipos principales utilizados para la integración térmica [29].

2.3.1 Intercambiadores de Calor

Un intercambiador de calor es un equipo que se utiliza para transferir energía térmica (entalpía) entre una superficie sólida y uno o más fluidos o entre partículas sólidas y un fluido. Su configuración depende de las diferentes temperaturas a las que la transferencia de calor ocurre, y de la manera en que se efectúa el intercambio (por mezcla o a través de una pared). Los ejemplos de intercambiadores de calor incluyen intercambiadores de calor de carcasa y tubo (STHE, Figura 2), de doble tubo e intercambiador de placas, todos conocidos como intercambiadores de calor de superficie.

Los intercambiadores más utilizados son los intercambiadores de calor de carcasa y tubos debido a su fabricación relativamente simple y a su adaptabilidad a diferentes condiciones de operación. Pueden tener un solo paso por los tubos (intercambiador de calor de un solo paso) o más de una corriente pasa por los tubos o por el lado de la carcasa (intercambiador de calor de múltiples pasos) [10].

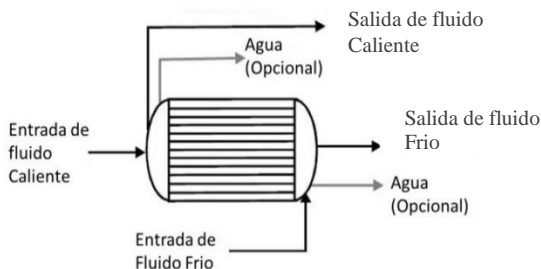


Figura 2. Intercambiador de calor de carcasa y tubos [10]

Mediante la configuración de las corrientes de intercambio de calor, pueden existir tres configuraciones principales de intercambiador de calor: flujo paralelo, contracorriente y flujo cruzado [29].

2.3.1.1 Contracorriente

Como se ilustra en la Figura 3, se presenta un contraflujo cuando los dos fluidos fluyen en la misma dirección, pero en sentidos opuestos (Flechas rojas). Los fluidos entran al intercambiador por diferentes extremos: el fluido frío sale del intercambiador en el extremo donde entra el fluido caliente, mientras que la temperatura del fluido más frío se aproximará a la temperatura del fluido de entrada. Según [46], este tipo de intercambiador es más eficiente que el intercambiador en paralelo y el de flujo cruzado, descritos a continuación.

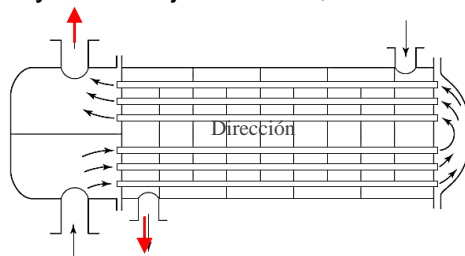


Figura 3. Intercambiador de calor de carcasa y tubo a contracorriente [28].

2.3.1.2 Paralelo

Existe un flujo paralelo cuando el flujo interno de los tubos y el flujo externo de la carcasa se producen en la misma dirección. En este caso, los dos fluidos entran al intercambiador por el mismo extremo y estos presentan una diferencia de temperatura significativa. Como el calor se transfiere del fluido con mayor temperatura hacia el fluido de menor temperatura, la temperatura de los fluidos se aproxima la una a la otra, es decir que uno disminuye su temperatura y el otro la aumenta tratando de alcanzar el equilibrio térmico entre ellos, Figura 4 [46].

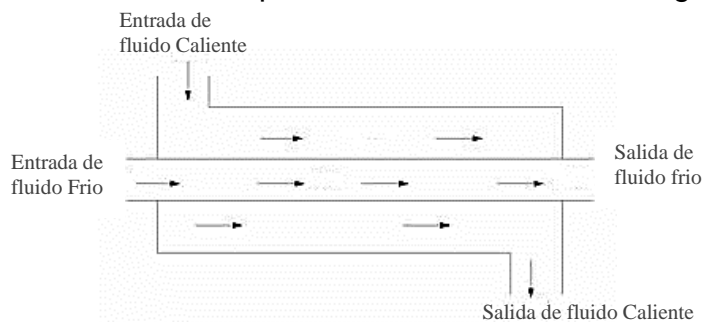


Figura 4. Intercambiador de calor de doble tubo [28].

2.3.1.3 Flujo Cruzado

En la Figura 5, se muestra como en el intercambiador de calor de flujo cruzado, uno de los fluidos fluye de manera perpendicular al otro fluido, esto es, uno de los fluidos pasa a través de tubos mientras que el otro pasa alrededor de dichos tubos formando un ángulo de 90° . Los intercambiadores de flujo cruzado son comúnmente usados cuando uno de los fluidos presenta cambio de fase.

Un ejemplo típico de este tipo de intercambiadores se observa en los sistemas de condensación de vapor, donde agua fría fluye por dentro de los tubos y absorbe el calor del vapor que sale de una turbina y entra como flujo externo, dentro de la carcasa del condensador, condensándose. Se pueden condensar grandes volúmenes de vapor de agua al utilizar este tipo de intercambiadores de calor [46].

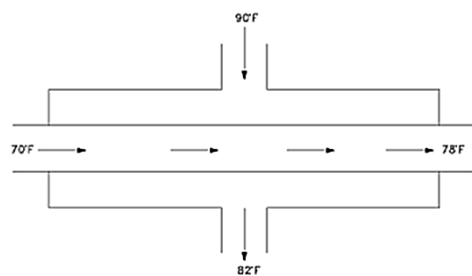


Figura 5. Intercambiador de calor de flujo cruzado [46].

2.3.2 Caldera

Es un aparato diseñado para calentar agua hasta alcanzar su punto de ebullición. En este punto, ésta se evapora y sale de la caldera. El equipo cuenta con cámara(s) de combustión, intercambiador(es) de calor, quemador(es) y piloto(s). Utiliza como combustible Gas L.P. o Gas Natural, y debe tener un control de temperatura automático (termostato) o control de encendido por presión y aislamiento térmico. Se pueden clasificar en dos grandes grupos: de tubos de humos (o piro tubulares) y de tubos de agua (o acuotubulares) [43].

El vapor producido en la caldera, en condiciones ideales, no contiene sólidos. A medida que el vapor sale, se agrega igual cantidad de agua de alimentación, con lo que más sólidos ingresan al sistema. Por lo tanto, los sólidos contenidos en el agua que permanece en la caldera resultan cada vez más concentrados. Si la caldera no se purga, los sólidos se concentran hasta que superan sus límites de solubilidad. Estos sólidos en suspensión, dependiendo de su naturaleza, precipitan y se depositan sobre las superficies de calefacción calientes (tubos), sufriendo transformaciones químicas que los convierten en incrustaciones; o simplemente incrementan los sólidos en suspensión en el agua de la caldera.

Los problemas creados por los sólidos en los sistemas de vapor son muchos, tales como problemas de corrosión, pérdida de eficiencia, falla de los tubos de la caldera y de los sobre-calentadores y erosión de las turbinas, etc. Mediante la purga se puede mantener bajo control la concentración de los sólidos en el interior de la caldera. Esta purga puede hacerse en forma continua o periódicamente. La purga se regula para mantener la concentración de sólidos dentro de ciertos valores, que dependen fundamentalmente de la presión de operación y de la potencia de la caldera [54].

2.4 Técnicas de Simulación

Como alternativa a las técnicas de programación matemática, clásicamente utilizadas para estudiar integración energética, en este trabajo se propone una estrategia combinando simulación y optimización. Se sustituye el modelo matemático por un modelo de simulación, el cual será posteriormente optimizado gracias a una técnica metaheurística. En esta sección, se detalla la parte relacionada con simulación.

La simulación es un instrumento eficaz para el análisis y diseños de sistemas, que permite la construcción de modelos dando una representación exacta del mundo real. Los simuladores de procesos pueden dividirse según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular:

- a) Simuladores globales u orientados a ecuaciones.
- b) Simuladores secuenciales modulares.
- c) Simuladores híbridos o modular secuencial-simultáneo.

Bajo el enfoque de la simulación global u orientada a ecuaciones (Estrategia simultánea), se plantea el modelo matemático que representa al proceso [1]. En este método las ecuaciones del modelo, algebraicas, no lineales y diferenciales, se integran en un único conjunto y se resuelven simultáneamente [30]. Estas ecuaciones pueden simplificarse para representar un estado estacionario, o al contrario pueden integrarse con respecto al tiempo, que representa el principal parámetro en la mayoría de los estudios de simulación dinámica [1]. Sus características principales son la mayor velocidad de convergencia y el hecho de que no existe distinción entre variables de procesos y parámetros operativos, lo que simplifica los problemas de diseño [30].

Un simulador modular secuencial se fundamenta en módulos de simulación independientes, que siguen la misma secuencia que las operaciones unitarias de una planta industria. Los cálculos se efectúan unidad por unidad de forma

secuencial; cada módulo representa un proceso de operación realizada en la planta y consta de un subprograma cuyo fin es calcular los flujos o corrientes de salida a partir de los flujos de entrada. Sus características principales son las siguientes: los modelos individuales se resuelven de forma eficaz, permite resolver las corrientes de reciclo en el proceso mediante un procedimiento iterativo y comprende una extensa biblioteca de módulos y rutinas de cálculo [30].

Finalmente, los simuladores híbridos utilizan una combinación entre el método secuencial y el simultáneo. Cada iteración se compone de dos pasos: el primero consiste en la solución de los modelos con estrategia secuencial, mientras que en el segundo, se actualizan los parámetros de acuerdo a la solución obtenida en el primer paso para hallar una solución de manera simultánea [30]

2.4.1 Ventajas

Algunas ventajas concretas que proporciona la simulación de procesos son:

1. Detecta ineficiencias debidas a la descoordinación entre secciones de una misma planta.
2. Anticipa lo que pasaría si cambiara el valor de parámetros como unidades a fabricar, operarios, máquinas, etc.
3. Informa de los costos reales por artículo, valorando el impacto real de cada lote dentro del total a fabricar.
4. Descubre errores de diseño en el modelo en lugar de hacerlo en el sistema real.
5. Proporciona un control sobre el tiempo, debido a que es un fenómeno que se puede acelerar o retardar según se desee [1].

Es de particular interés para este proyecto recordar que los simuladores pueden fácilmente relacionarse con otras herramientas computacionales. Por ejemplo, un simulador puede ser llamado desde otro proceso (un programa) que le transmite algunos parámetros de entrada y recupera, terminada la simulación, otros datos de salida. El caso más común es utilizar Excel como interfaz de un simulador de proceso, usando codificación de Visual Basic for Applications (VBA). Esta metodología tiene las siguientes ventajas:

1. Transformar los valores de las variables de decisión de una hoja de Excel a un simulador de procesos.
2. La interfaz de un simulador con Excel es útil para realizar una simulación varias veces, para el diseño y para los cambios operativos en el proceso. Los resultados de la simulación del proceso pueden ser guardados en las hojas de cálculo Excel para el análisis posterior [23].



2.4.2 Paquetes de simulación

Los principales softwares dedicados a la simulación de procesos químicos son los siguientes:

2.4.2.1 Aspen Plus

Aspen Plus es el software de optimización de procesos químicos utilizado por la mayoría de las industrias químicas y bioquímicas, así como la industria de polímeros para el diseño, operación y optimización de instalaciones de fabricación seguras y rentables. Ofrece la posibilidad de simular diversas combinaciones de operaciones unitarias tales como reactores, torres de destilación, intercambiadores de calor y compresores utilizando los modelos de proceso incorporados.

Permite mejorar el modelado de procesos en estado estacionario, mediante la creación potentes simulaciones dinámicas para un mejor análisis del comportamiento de la planta y la seguridad. El modelado dinámico del proceso es crucial para obtener una visión integral del comportamiento de la planta, ejecutar escenarios de emergencia, evaluar procedimientos de inicio y cierre, probar esquemas de control, diseñar procesos por lotes y más [8].

2.4.2.2 ProSim

Líder en el campo de desarrollo de software para la ingeniería química, ProSim proporciona un paquete de simulación y optimización de procesos, así como servicios de investigación en las áreas de petróleo, química, farmacéutica, energía y otras industrias de procesos en todo el mundo. Se utiliza para mejorar el diseño del proceso, aumentar la eficiencia de la planta, reducir su impacto sobre el medio ambiente, modelar sistemas altamente no lineales y realizar estudios de factibilidad [48].

2.4.2.3 CHEMCAD

El software CHEMCAD permite crear de manera interactiva diagramas de circulación de materiales, simular todos los procesos fundamentales, incluidos los procesos de regulación, y visualizar una representación gráfica de los resultados. El paquete cuenta con una amplia base de datos de materiales, diversos modelos termodinámicos e interfaces abiertas para MS-Excel y VBA.

Representa una herramienta auxiliar para seleccionar el mejor modelo, evaluar las sustancias y los parámetros y proporcionar una propuesta sobre sus propios algoritmos para calcular los datos materiales [15].

2.4.2.4 Ciclo de Tiempo

Con este software, se puede diseñar, analizar, optimizar y monitorear la termodinámica del sistema de energía diseñado y operado. Tiene una amplia biblioteca de modelos innovadores (células de combustible, IGCC, plantas de captura de CO₂, turbogeneradores ORC, sistemas de absorción de refrigeración, etc.). Contiene modelos predeterminados de componentes e incluso de sistemas completos de conversión de energía, que pueden ser adaptados a las necesidades especiales del usuario, acortando el tiempo de desarrollo del modelo. Incluye un resolutor robusto y eficiente para grandes sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales, adaptado al caso especial de los balances de masa y energía [9].

2.4.2.5 EMSO

EMSO es un simulador orientado a ecuaciones con una interfaz gráfica para modelar procesos complejos dinámicos o en estado estacionario. Contiene modelos pre-construidos disponibles en la biblioteca de modelado. Los nuevos modelos se pueden escribir en el lenguaje de modelado EMSO o el usuario puede incorporar modelos codificados en C, C++ o Fortran en el entorno de simulación [51].

2.4.2.6 Hidro-Flujo

Es un poderoso software de análisis de sistemas de tuberías y tuberías aisladas. Puede analizar cualquier tipo de flujo de líquido incompresible. Se pueden modelar muchos tipos de sistemas de transporte incluyendo sistemas de flujo abierto, descarga, cerrados de recirculación y de gravedad. Procesos industriales, suministro de agua, tratamiento de aguas residuales, protección contra incendios, sistemas de rociadores, procesos químicos, desagüe de minas, piscinas, estanques / riego y sistemas HVAC pueden ser rápidamente creados, analizados y resueltos para flujos y presiones y parámetros de operación en estado estacionario.

Además, prácticamente cualquier tipo de elemento de sistema de tubería se puede describir utilizando la amplia variedad de componentes de modelado hidráulicos disponibles. Los modelos de sistemas de transporte de fluidos se pueden construir

de forma rápida y sencilla mediante la selección de los elementos (tuberías, bombas, depósitos, calibradores, accesorios y válvulas) en el espacio de trabajo utilizando numerosas funciones de edición incluidas [56].

2.4.3 Trabajos relacionados

Uno de los trabajos que muestran la interrelación entre la integración energética y/o térmica adaptada a la simulación del proceso es el abordado por Higa et. al., (2009) en donde proponen una integración térmica con un enfoque combinando simulación y análisis pinch, para minimizar el consumo energético en el proceso para la producción de azúcar. La optimización se lleva a cabo a través de reglas heurísticas, para recuperar la energía térmica de un evaporador y aprovecharla en el proceso, variando el número de equipos [39].

Por otro lado, Abdullah Alqahtani (2008) ataca el problema de integración energética y térmica con un enfoque de simulación y optimización fundamentado en programación matemática. Como simulador de procesos se utilizan el software Aspen HYSYS y Aspen Icarus como evaluador económico para la síntesis de diversos procesos químicos. El optimizador utilizado es un componente del mismo HYSYS [5].

2.5 Técnicas de Optimización

Los problemas de diseño de procesos de integración energética se formulan típicamente como problemas de optimización. Con análisis Pinch o con Programación Matemática, el objetivo consiste en determinar los flujos, los equipos de intercambio de calor a usar, de tal manera que se minimice un costo de operación o de inversión asociado al sistema de estudio. En un problema de optimización, los tres componentes clave son: la función objetivo, las variables de decisión y las restricciones. La formulación clásica de un problema de optimización se detalla en la ecuación 3.

$$\begin{array}{ll} \text{Min} & z = f(x) \\ & (3) \\ \text{s.t.} & g(x) \leq 0 \\ & h(x) = 0 \\ & x \in \Omega \end{array}$$

La función objetivo f es una expresión matemática que, para el mejor valor de las variables de diseño, alcanza un mínimo o máximo. Ésta puede ser lineal o no lineal, y puede implicar más de una variable. Las variables de decisión (vector x) las constituyen todos los parámetros sobre los cuales se puede actuar para

mejorar el valor de la función objetivo. Las restricciones formulan la descripción del modelo estudiado y pueden ser de igualdad, h (la mayor parte de estas restricciones se asocian a los balances de masa y energía del modelo); o, al contrario, se pueden formular restricciones de desigualdad, g , para, normalmente, establecer el respecto de cotas (tiempo máximo, cantidad máxima de un efluente, concentración máxima de un contaminante en un efluente, etc.).

El método elegido para cualquier problema de optimización depende principalmente de: las características de la función objetivo, la naturaleza de las restricciones y el número de variables independientes y dependientes manejadas. Efectivamente, los problemas de optimización pueden, en el caso más sencillo, implicar funciones lineales y variables reales, denotándose como problemas de programación lineal (LP). Si la función objetivo y/o las restricciones involucran términos no-lineales, entonces el problema de programación no lineal (NLP) requerirá, para su resolución, de técnicas diferentes. Finalmente, para problemas de optimización que implican tanto variables discretas como continuas, el problema se vuelve de programación entera mixta (lineal: MILP; o no: MINLP).

Determinar el óptimo global del problema, es decir el vector de variables x que permite obtener el mejor valor (mínimo o máximo) de la función objetivo para todos los valores permisibles de las variables, puede volverse una tarea complicada de acuerdo a las características del problema. Efectivamente, en el caso de programas no-lineales y multi-modales, pueden aparecer óptimos locales, o sea soluciones tales que ningún punto ubicado en su entorno (definido de alguna manera) puede mejorarla en términos de la función objetivo [5]. Por otro lado, las variables discretas pueden crear un espacio de búsqueda inmensamente grande, que en ciertos casos no se puede explorar de manera eficiente mediante métodos de enumeración y árboles de búsqueda (problema NP-Difícil). Entonces, el uso de algoritmos de optimización exactos y las herramientas de Programación Matemática, típicamente utilizados en Ingeniería de Procesos, no pueden siempre garantizar la obtención del óptimo local en tiempos de cómputo razonables.

Finalmente, cabe mencionar el caso, particularmente relevante para este proyecto, en el que no se dispone de un modelo matemático formulado de manera analítica como en la ecuación 3, sino que sólo se tiene una herramienta (por ejemplo, un simulador) que permite dar una evaluación de la función objetivo y, eventualmente, de la factibilidad, de alguna solución específica (variables de entrada). En estos casos, el uso de técnicas exactas se ve aún más dificultado, ya que no se tienen las garantías de continuidad y derivabilidad necesarias a su aplicación. Es por todos los motivos antes mencionados que se decidió, en este estudio, dedicar una atención particular a las técnicas heurísticas y metaheurísticas de optimización.

2.5.1 Heurísticas

Los métodos heurísticos pueden ser muy útiles para analizar sistemas de interés y sugerir alternativas relevantes para su diseño. La palabra heurística es de origen griego y significa "descubrir". El término "heurístico" se utiliza generalmente para referirse a técnicas o reglas basadas en el conocimiento empírico del problema considerado, que permiten generar soluciones correctas o de calidad satisfactoria, en tiempos razonables. En el método heurístico, el espacio de diseño se reduce hasta que queda un diseño aceptable.

Existen varios métodos heurísticos para resolver una gran variedad de clases de problemas de optimización, generalmente diseñados específicamente para los problemas que tratan de resolver [5].

2.5.2 Reglas metaheurísticas

Una regla metaheurística representa una extensión de las capacidades de las heurísticas, siendo un proceso iterativo de generación de soluciones de acuerdo a una estrategia a un nivel superior, que explora espacios de búsqueda usando diferentes métodos. Típicamente, una técnica metaheurística combina diferentes heurísticas e integra otros factores como la estocasticidad, de acuerdo a un paradigma global, que puede ser inspirado de procesos biológicos físicos, sociales, entre otros. Además, es de gran importancia que la técnica metaheurística implemente un balance dinámico entre etapas de diversificación y de intensificación de la búsqueda. El término diversificación generalmente se refiere a la exploración del espacio de solución, promoviendo en el proceso de búsqueda el examen de regiones no visitadas para generar soluciones que difieran de manera significativa de las actuales. Al contrario, el término intensificación se refiere a la explotación de la experiencia de búsqueda acumulada, enfocando la búsqueda en la vecindad de las mejores soluciones encontradas [27].

Cada metaheurística incluye los siguientes mecanismos internos: generación de soluciones iniciales, operadores de variación que permiten producir soluciones nuevas y operadores de selección, que permiten orientar la búsqueda en una dirección u otra, basándose eventualmente en la trayectoria anterior. Estos procedimientos heurísticos, propios a la metaheurística considerada, permiten a su vez encontrar soluciones de buena calidad, aunque sin garantía de optimalidad, y guiar el procedimiento de búsqueda basado en aprendizaje para evitar que el método quede atrapado en un óptimo local [5]. Algunos ejemplos de metaheurísticas son:

- Optimización por enjambres de partículas [57].

- Algoritmos genéticos [52].
- Evolución Diferencial [53].
- Recocido simulado [4].
- Búsqueda local [58].
- Búsqueda Tabú [36].
- Optimización por Colonia de Hormigas [35]

Existen dos clases principales de metaheurísticas. En primer lugar, las técnicas de búsqueda local [58] como por ejemplo el recocido simulado [4] o la búsqueda tabú [36]. Los métodos de búsqueda local comienzan con una solución inicial, luego exploran soluciones en el vecindario del punto inicial. El proceso mueve hacia alguno de los vecinos generados en el paso anterior, o se queda en la solución actual, de acuerdo a una regla de reemplazo predefinida. Este procedimiento se repite hasta que se alcanza un criterio de paro.

Por otro lado, la otra clase la conforman las técnicas poblacionales o distribuidas, así llamadas por que manejan, en cada iteración, un conjunto (o población) de soluciones. Esta clase misma puede ser dividida entre Algoritmos Evolutivos (como Algoritmos Genéticos [52] y Evolución Diferencial [53]), basados en los principios darwinianos de la Evolución, y técnicas de inteligencia colectiva (como Optimización por enjambres de partículas [57] y Optimización por Colonia de Hormigas [35]), que reproducen normalmente el modo operativo de ciertas especies para encontrar comida, comunicar, etc.

2.5.3 Algoritmos Evolutivos

Los algoritmos evolutivos (AEs) constituyen una técnica poderosa de búsqueda y optimización con un comportamiento altamente paralelo, inspirada en el principio darwiniano (evolución de las especies), en la selección natural y reproducción genética.

2.5.3.1 Funcionamiento General

Los AEs combinan la búsqueda estocástica, obtenida por las transformaciones aleatorias de la población (mutación, reproducción), con una búsqueda dirigida, dada por la selección natural. En esto difiere de los operadores deterministas utilizados en la mayoría de los métodos clásicos de optimización. Un AE comienza su búsqueda con una población de soluciones generalmente creadas al azar dentro de unos límites específicos a cada variable [32]. Los individuos, que representan las soluciones del problema, se alteran mediante ciertos operadores de variación (o genéticos). Dentro de la población, cada individuo es evaluado con

su valor de aptitud, que es obtenido usando alguna medida relacionada con el problema a resolver, típicamente la función objetivo y/o las restricciones consideradas. Este valor de aptitud permite llevar a cabo procesos de selección de los más aptos, que, repetidos a través de la simulación iterada de varias generaciones, permite la evolución de la población hacia buenas soluciones del problema de optimización considerado [8].

Debido a su robustez y generalidad, los AEs son especialmente adecuados en los casos en que las estrategias convencionales fracasan. Proporcionan buenas soluciones incluso a difíciles problemas combinatorios, incluyendo los que se muestran como NP-Difíciles. Por lo tanto, son adecuados para tratar las clases de problemas de optimización compleja en la ingeniería química, que frecuentemente se formulan como programas no lineales, enteros mixtos, o multiobjetivo [12].

Si un problema de optimización tiene un solo óptimo global, se espera que todos los miembros de la población de un AE puedan converger a esa solución óptima. Sin embargo, si un problema de optimización tiene múltiples soluciones óptimas, puede utilizarse un AE para capturar todas las soluciones óptimas en la población final [32].

El pseudocódigo y la estructura general de un AE se ilustran en las Figuras 6 y 7. A la población $P(t)$ en alguna generación t se le aplican operadores genéticos y de reemplazo para construir la población de la generación siguiente, $t+1$. La operación se detiene cuando se cumplen uno o más criterios de terminación pre-especificados. A menudo, se utiliza un número predeterminado de generaciones o un tiempo máximo de cómputo como criterio de paro. En otros estudios más recientes, se usan condiciones teóricas de optimalidad (tales como el grado de satisfacción de las condiciones de Karush-Kuhn-Tucker, KKT) [32].

Comienzo

$t:=0$;

Inicializar $P(t)=\{I_i \mid i = 1, \dots, \lambda\}$;

Evaluar $P(t)$;

Mientras no termine $P(t)$ **hacer**

$P'(t) := \text{recombinar } P(t)$;

$P''(t) := \text{mutar } P'(t)$;

Evaluar $P''(t)$;

$P(t+1) := \text{seleccionar } (P''(t) \cup P)$;

$t := t+1$;

Fin

Figura 6. Pseudocódigo de funcionamiento de un AE [12].

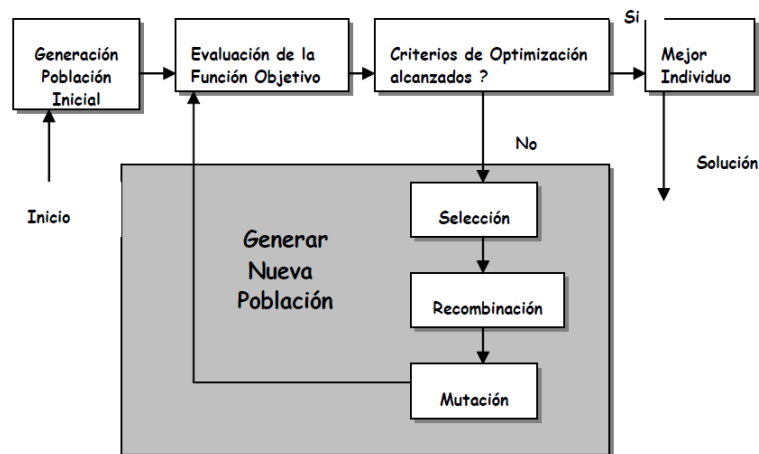


Figura 7. Diagrama de funcionamiento de los AEs [8]

2.5.3.2 Mecanismos internos clásicos de un AE

Como indicado en las figuras anteriores (Figuras 6 y 7), los AEs utilizan cuatro operadores principales: selección, cruza, mutación y preservación de los miembros de élite [32, 35].

a) Selección

Entre el conjunto de soluciones candidatas generadas, aleatoriamente o por los operadores de cruza y mutación, muchas serán eliminadas y otras pueden resultar prometedoras para la solución del problema. Estas candidatas prometedoras pueden ser seleccionadas en dos ocasiones: primero, para determinar a qué individuos se le permite reproducirse para construir individuos nuevos (hijos). Por otro lado, la selección también se aplica para elegir aquellos individuos que sobreviven y participan en la construcción de la generación siguiente. El operador de selección debe mantener constante el número de individuos de la población y la expectativa es que la aptitud media de la población se incremente en cada generación.

En muchos casos, aquellos que tengan los mejores valores de la función de aptitud (*fitness*) serán seleccionados, pero es importante integrar elementos de estocasticidad en el proceso para mantener la diversidad de la población y poder escapar de óptimos locales [22].

Así pues, técnicas probabilísticas permiten asegurar que el individuo con mayor valor de aptitud tiene mayores posibilidades de ser seleccionado en la siguiente generación. Un AE puede utilizar muchas técnicas diferentes para seleccionar a los individuos que deben copiarse hacia la siguiente generación, por ejemplo:

- **Selección elitista:** se combina la población antigua con la población recién creada y se garantiza la selección de los miembros más aptos de esta

población combinada, manteniendo las mejores soluciones en términos de la aptitud.

- **Selección proporcional a la aptitud:** los individuos más aptos tienen más probabilidad de ser seleccionados, pero no la certeza. Estas técnicas incluyen la ruleta de Goldberg o la selección escalada (que permite aumentar la presión selectiva, haciendo la función de aptitud más discriminadora cuando todos los individuos tienen una aptitud relativamente alta y sólo les distinguen pequeñas diferencias).
- **Selección por torneo:** se eligen subgrupos de individuos de la población, y los miembros de cada subgrupo compiten entre ellos. Sólo se elige a un individuo de cada subgrupo para la reproducción o la supervivencia. La estocasticidad interviene en la selección de los integrantes del grupo y en las reglas del torneo.
- **Selección por jerarquías:** a cada individuo de la población se le asigna un orden numérico basado en su aptitud, y la selección se basa en este ranking. La ventaja de este método es que puede evitar que individuos muy aptos tengan muchas copias de ellos en la generación siguiente.
- **Selección generacional:** la descendencia de los individuos seleccionados en cada generación se convierte en toda la siguiente generación. No se conservan individuos entre las generaciones.
- **Selección por estado estacionario:** la descendencia de los individuos seleccionados en cada generación vuelven al acervo genético preexistente, reemplazando a algunos de los miembros menos aptos de la población actual [8].

b) Cruza y Mutación (operadores genéticos)

Los individuos más aptos, seleccionados para producir soluciones nuevas, deben ser alterados aleatoriamente con la esperanza de mejorar su aptitud para la siguiente generación. Existen dos estrategias básicas para llevar esto a cabo. La primera se llama *mutación* y, al igual que una mutación en los seres vivos, consiste en efectuar una perturbación local en el cromosoma del individuo afectado. Este operador unario (se aplica tomando un solo individuo base) causa alteraciones reducidas y aleatorias en puntos concretos del código de un individuo. Al contrario, el operador de recombinación, o de cruza, implica elegir a dos individuos para que intercambien segmentos de su patrimonio genético (código), produciendo una “descendencia” artificial, cuyos individuos son combinaciones de sus padres. Este operador es binario, ya que utiliza dos individuos base, los

padres, para crear, en una mayoría de casos, al menos dos individuos nuevos, los hijos [8].

Cabe mencionar que estos operadores trabajan típicamente sobre la cadena cromosómica de los individuos, es decir el código genético representando una solución. Esta codificación debe de adaptarse al problema tratado y, por lo tanto, puede ser binaria, bajo la forma de números enteros, reales, de permutaciones, etc. Los operadores se adaptan por lo tanto a la representación de una solución en el problema de interés. Por ejemplo, para una codificación binaria de la solución, la mutación por complemento binario y la cruce de dos puntos son instancias clásicas de los operadores que pueden utilizarse.

c) Elitismo

Un método indispensable para permitir la convergencia de los AEs es el elitismo. Consiste básicamente en hacer competir las soluciones de la población actual (los "padres") con las soluciones recién creadas por operadores genéticos (los "hijos", posteriormente mutados). Esta competición garantiza que el "movimiento general" de la población, en el transcurso de las generaciones sea hacia regiones "buenas" de la función a optimizar. Este mecanismo puede implementarse en dos etapas:

1. Se muestrea una élite de r miembros de entre los mejores de la población combinada (actual y nueva) y se incorporan directamente a la población siguiente, sin pasar por la población auxiliar.
2. La población auxiliar de soluciones candidatas nuevas se muestrea de entre los $n - r$ restantes miembros de la población combinada.

Comúnmente el tamaño de la élite r es pequeño, y el tipo de muestreo es directo o bien por sorteo [24]. Cabe mencionarse que históricamente los algoritmos evolutivos se han dividido en cuatro paradigmas clásicos; Estrategias Evolutivas, Programación Evolutiva, Algoritmos Genéticos, Programación genética [6], sin embargo existen técnicas más recientes y reconocidas, por ejemplo Evolución Diferencial (Price & Storn [31]) cuyo desempeño ha sido demostrado en varios estudios.

2.5.3.3 Ventajas de los Algoritmos Evolutivos

- d) Su modo operativo es paralelo. La mayoría de los algoritmos funcionan en serie y sólo pueden explorar el espacio de soluciones de acuerdo a una única trayectoria. Al contrario, ya que los AEs trabajan con una población de soluciones, pueden explorar el espacio de búsqueda en múltiples

direcciones a la vez, encontrando soluciones igualmente buenas al mismo problema.

- e) Funcionan particularmente bien resolviendo problemas cuyo espacio de búsqueda es potencialmente grande, demasiado vasto para hacer una búsqueda exhaustiva en un tiempo razonable. El paralelismo implícito de los AEs les permite superar este enorme número de posibilidades, y encontrar con éxito resultados cercanos al óptimo tras muestrear directamente sólo regiones pequeñas del vasto paisaje de aptitud.
- f) Se desenvuelven bien en problemas con un paisaje de aptitud complejo: aquéllos en los que la función de aptitud es discontinua, ruidosa, cambia con el tiempo, o tiene muchos óptimos locales. La mayoría de los problemas prácticos tienen un espacio de soluciones complejo, incluyendo multi-modalidades y óptimos locales. Los AEs, por su carácter poblacional y gracias al operador de mutación, han demostrado su efectividad al escapar de los óptimos locales e identificar el óptimo global.
- g) Otra área en el que destacan los AEs es su escalabilidad, es decir su habilidad para manejar muchas variables simultáneamente.
- h) Los AEs no saben nada más del problema a resolver sino saben la forma de evaluar la función objetivo de una solución. Los AEs realizan cambios aleatorios en sus soluciones candidatas y luego utilizan la función de aptitud para determinar si esos cambios producen una mejora, son por lo tanto adaptables a cualquier tipo de problemas.
- i) Son fáciles de implementar y de usar [8].

A continuación se describen en detalle dos Algoritmos Evolutivos particularmente importantes en el marco del presente proyecto, ya que serán implementados y probados para resolver el problema abordado: Estrategias Evolutivas y Evolución Diferencial. Cabe mencionar que estos dos AEs son diseñados para trabajar con variables reales, codificadas "tal cual" en el cromosoma de cada solución.

2.5.3.4 Estrategias Evolutivas (ES)

Propuestas por I. Rechenberg y H.P. Schwefel [26] en los años 1970, las ES representan un paradigma histórico de los AEs. En general, se considera que se mantienen μ individuos en la población, produciendo en cada generación una descendencia de λ individuos. Las variantes $(\mu + \lambda)$ y (μ, λ) difieren según la estrategia de selección empleada, aunque ésta suele ser determinista en ambos

casos. En la versión $(\mu + \lambda)$, los padres compiten contra los hijos y los μ mejores individuos, elegidos entre los μ padres actuales más los λ hijos, pasan a la generación siguiente. En la versión extintiva (μ, λ) , los padres no sobreviven y los μ mejores individuos, elegidos entre los λ hijos ($\lambda > \mu$), pasan a la generación siguiente. La versión más sencilla es la $(1+1)$ -ES, muy comparable a una búsqueda local glotona.

En el procedimiento clásico en una iteración de ES, la descendencia es generada en dos etapas. Un mecanismo de mutación consiste en la adición de una variable aleatoria independiente a cada elemento del vector padre. Los números aleatorios se extraen de una distribución gaussiana con media cero y una desviación estándar σ , donde σ se denomina tamaño de paso de mutación. El segundo mecanismo, que no necesariamente existe en todas las versiones, es un proceso de recombinación, producido en muchos casos como el centro de gravedad de los padres ponderados por su función de aptitud [26].

- **Para la mutación**

El operador de mutación en ES se basa en una distribución normal (Gaussiana) requiriendo dos parámetros la media (ξ) y la desviación estándar (σ). Por tanto las mutaciones son realizadas al añadir una perturbación Δx_i a cada variable x_i , donde los valores de Δx_i son creados aleatoriamente usando la Gaussiana $N(\xi, \sigma)$ con la correspondiente función de densidad de probabilidad (p.d.f):

$$p(\Delta x_i) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(\Delta x_i - \xi)^2}{2\sigma^2}} \quad (4)$$

En la práctica, la media ξ es siempre cero y el vector x es mutado para reemplazar los valores de x_i por:

$$x_i = x_i + N(0, \sigma) \quad (5)$$

Donde $N(0, \sigma)$ denota un número aleatorio con distribución Gaussiana de media cero y desviación estándar σ [3].

- **Para el tamaño de paso de la mutación, σ**

Este parámetro puede mantenerse fijo, o al contrario variar, durante una ejecución de ES. De manera similar, es posible definir un tamaño de paso único para todas las dimensiones del problema, o definir un tamaño de paso para cada variable. Muchas investigaciones han sido realizadas para determinar la mejor manera de ajustar este parámetro de estrategia (es decir, guiando la búsqueda).

Este interés dio lugar al desarrollo de sofisticadas formas de control del tamaño de paso y conllevó el desarrollo de un concepto novedoso en la computación evolutiva, la auto-adaptación de los parámetros de la estrategia. En general, la auto-adaptación significa que algunos parámetros del algoritmo son variados durante una corrida, de la misma manera que las variables de decisión del problema de optimización. Formas recientes de ES, como la versión CMA-ES (para Covariance Matrix Adaptation based Evolutionary Strategy, [41]), se encuentran entre los principales algoritmos para la resolución de problemas complejos de optimización continua.

Sin embargo, existen mecanismos más sencillos y empíricos de ajustar y actualizar el tamaño de paso, aprendiendo del proceso de búsqueda, como la regla de 1/5 de éxito [26]. Se considera que si muchas mutaciones producen individuos mejores que su respectivo padre, el proceso se enfoca actualmente en la intensificación y conviene diversificar la búsqueda, aumentando el tamaño de paso. Al contrario, si hay pocas mutaciones exitosas, significa que el algoritmo busca de manera aleatoria y conviene intensificar la búsqueda reduciendo el tamaño de paso. Esta regla es ejecutada en un intervalo periódico, por ejemplo después de k iteraciones, cada σ es actualizado por:

$$\sigma = \begin{cases} \frac{\sigma}{c} & \text{si } p_s > 1/5 \\ \sigma * c & \text{si } p_s < 1/5 \\ \sigma & \text{si } p_s = 1/5 \end{cases}$$

Donde p_s es la frecuencia relativa de mutaciones exitosas medidas a lo largo de una k iteraciones y c es un parámetro tal que $0.817 \leq c \leq 1$ [3].

- **Para la cruce o recombinación**

El esquema de recombinación básica en las estrategias de evolución involucra a dos padres (dos vectores \bar{x} y \bar{y}) que crean un hijo (\bar{z}). Para obtener λ recombinaciones se lleva a cabo λ veces. Ausente de la versión canónica de las ES, este operador se puede implementar de diferentes maneras. En la recombinación discreta, se seleccionan algunos elementos de la solución padre y los demás se toman del mutante. La recombinación intermedia promedia los valores del padre y del mutante. Para casos de población mayor a 2, una técnica consiste en obtener el baricentro de los padres, ponderado por su aptitud, y generar diferentes mutantes a partir de este centro de gravedad. Después de crear λ descendientes y calcular su fitness el mejor de ellos es escogido determinísticamente [3]. Cabe mencionarse que en la versión (1+1)-ES ocupada en este trabajo, no hay operador de cruce.

2.5.3.5 Evolución Diferencial (DE)

La técnica de Evolución Diferencial es un AE mucho más reciente que las ES, propuesto en 1995 [53] por R. Storn y K. Price, particularmente adaptado para la solución de problemas de optimización continuos, que utiliza NP vectores D-dimensionales reales.

$$x_{i,G}, i = 1, 2, \dots, NP \quad (6)$$

Esta población inicial de vectores se elige de forma aleatoria y uniforme [53]. La mayor peculiaridad de este método es el operador de mutación, que consiste en la construcción de vectores nuevos a partir de operaciones aritméticas (diferencia ponderada) de individuos elegidos al azar de entre la población actual. Los mutantes son obtenidos de la siguiente manera:

$$v_{i,G+1} = x_{r1,G} + F * (x_{r2,G} - x_{r3,G}) \quad (7)$$

Donde x_{r1} , x_{r2} y x_{r3} son individuos de la población distintos entre sí (el tamaño de población, NP, debe cumplir: $NP \geq 4$) y F es el parámetro de amplificación (en general, $F \in [0, 2]$, ver [53]), que controla la magnitud de la variación diferencial $(x_{r2,G} - x_{r3,G})$.

Una vez obtenido el vector mutante, la recombinación se efectúa de manera aleatoria, comparándolo con el vector base original (x_i):

$$u_{ji,G+1} = \begin{cases} v_{ji,G+1} & \text{si } (randb(j) \leq CR) \text{ o } j = rnbr(i) \\ x_{ji,G} & \text{si } (randb(j) > CR) \text{ y } j \neq rnbr(i) \end{cases} \quad j = 1, 2, \dots, D.$$

Donde:

$randb(j)$ es un número aleatorio asociado a la j -ésima variable, uniformemente generado en el intervalo $[0, 1]$.

CR es la tasa de recombinación o cruza, constante con $CR \in [0, 1]$, que controla la proporción del mutante apareciendo en el individuo hijo. Este parámetro es determinado por el usuario.

$rnbr(i)$: es un índice elegido aleatoriamente dentro de $\{1, 2, \dots, D\}$, donde D es el número de dimensiones del problema. Permite asegurar que el hijo $u_{i,G+1}$ obtenga al menos una variable del mutante $v_{i,G+1}$ [53].

Para decidir si el hijo debe ser o no un miembro de la generación $G+1$, el vector $u_{i,G+1}$ se compara con el vector base $x_{i,G}$ usando un criterio glotón. Si el vector

$u_{i,G+1}$ produce un valor de la función de costo menor que $x_{i,G}$, entonces $u_{i,G+1}$ sustituye a $x_{i,G+1}$. De lo contrario, $x_{i,G}$ se mantiene sin cambiar [53].

- **Otras variables de ED son:**

Varias versiones de ED han sido propuestas en el mismo artículo introductorio de [Storn&Price, 43]. Con el fin de clasificar las diferentes variantes se usa la notación; DE/x/y/z donde:

x especifica el vector base a mutar, que puede ser aleatorio (como en el caso presentado anteriormente, r1 se elige de manera aleatoria), en este caso x=rand. Al contrario, se puede sesgar la búsqueda, eligiendo el mejor individuo de la población actual (x=best).

y es el número de diferencias utilizadas (en el caso anterior, se agrega al vector base una sola diferencia entre vectores, o sea y=1).

z denota el esquema de cruce, que puede ser binomial, como en nuestro ejemplo (z=bin) o exponencial (z=exp).

Los siguientes son las diez estrategias diferentes propuestas por Price & Storn [31].

1. ED/best/1/exp
2. ED/rand/1/exp
3. ED/rand-to-best /1/exp
4. ED/best/2/exp
5. ED/rand/2/exp
6. ED/best/1/bin
7. ED/rand/1/bin
8. ED/rand-to-best/1/bin
9. ED/best/2/bin
10. ED/rand/2/bin [31]

Usando esta notación, la estrategia básica de DE descrita previamente puede escribirse como: DE/rand/1/bin. Sin embargo, un método altamente beneficioso que merece especial atención es el método DE/best/2/bin propuesto por Price en 1996, donde:

$$v_{i,G+1} = x_{best,G} + F * (x_{r1,G} + x_{r2,G} - x_{r3,G} - x_{r4,G}) \quad (8)$$

El uso de dos vectores de diferencia parece mejorar la diversidad de la población. [53] En este estudio, se usará la versión DE/rand/1/bin que, sin información previa sobre el problema estudiado, es la más clásicamente empleada.

CAPÍTULO 3

Metodología

En este capítulo, se plantea el problema de recuperación de energía térmica mediante el aprovechamiento del calor proveniente de agua de purga y la metodología propuesta para su tratamiento. Se describe en un primer tiempo el proceso general, así como las modificaciones propuestas en el mismo para implementar dicha estrategia de integración energética. Luego, se presenta la estructura global del enfoque de resolución desarrollado, relacionando las etapas de modelado, simulación y optimización del proceso, además de la interfaz vinculando las diferentes herramientas computacionales utilizadas.

Posteriormente, se describe el modelo de simulación completo con Aspen Plus, incluyendo todos los aspectos relacionados con la simulación (diagrama de flujos, descripción de los equipos, modelos termodinámicos y reacciones químicas involucradas, etc.). En base a este modelo de simulación, se define el problema de optimización correspondiente y la implementación de las técnicas de solución (Algoritmos Evolutivos) elegidas. Finalmente, se describe la interfaz utilizada para vincular el simulador (Aspen Plus) y los optimizadores implementados en Matlab.

3.1 Descripción del proceso original y propuesta de integración

Como se ha mencionado en este trabajo las industrias utilizan grandes cantidades de energía para producir vapor, una parte del agua alimentada a las calderas se evapora para formar vapor y la otra es eliminada de la caldera mediante purgado (cumpliendo un número de ciclos de concentración antes de ser purgada, dependiendo de la presión de trabajo de la caldera y de la calidad de agua de alimentación a la caldera). Cabe mencionarse que el agua de las purgas de la caldera se encuentra a la misma temperatura que el vapor de agua. Sin embargo, muchas veces esta energía no se recupera, y esta agua va directamente a la planta de tratamiento de aguas o en el peor escenario al drenaje.

Normalmente, los elementos que componen el proceso de producción de vapor constan de un equipo de purificación (suavización, desmineralización u osmosis inversa), de bombas centrífugas a la salida de estos equipos, de un tanque de condensados para precalentar el agua de alimentación a la caldera y la caldera misma, como se ilustra en figura 8.

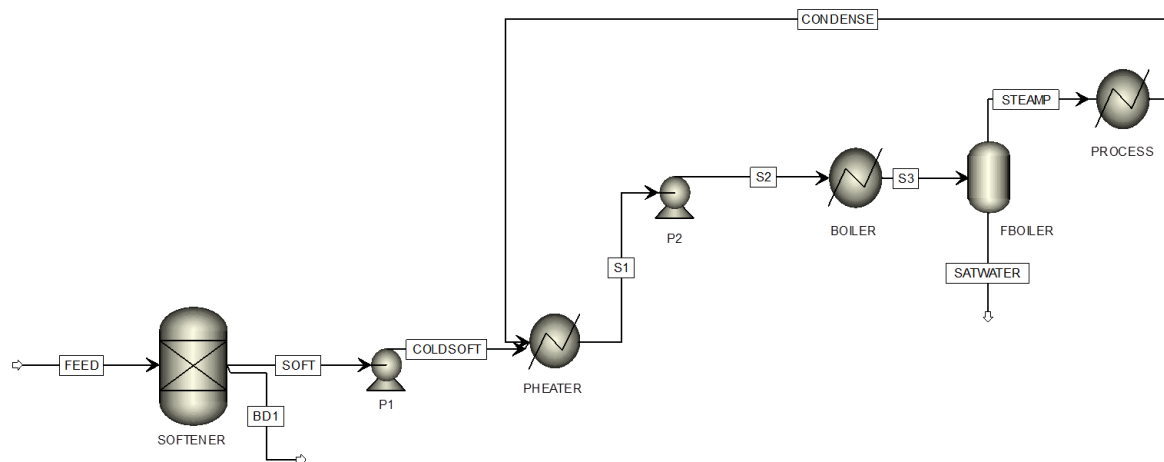


Figura 8. Proceso general de producción de vapor

Para optimizar el uso de energía en el proceso de producción de vapor, se propone la modificación al modelo representado en el diagrama de flujo de la Figura 9, en el que para aprovechar la energía contenida en el agua de purga de caldera (corriente SATWATER) se propone la colocación de un intercambiador de calor (HE1). El modelo propuesto se describe a continuación. El proceso se alimenta con agua dulce (flujo FEED). Sin embargo, esta corriente necesita una etapa de ablandamiento para eliminar los carbonatos y bicarbonatos principalmente de magnesio y calcio. Esta operación se realiza a través de un elemento separador de componentes (SOFTENER), que funciona en condiciones de temperatura y presión estándar. En el proceso original de la Figura 8, el agua purificada pasa a través de una bomba para impulsar el fluido al pre-calentador (PHEATER).

Al contrario, en el proceso modificado indicado en la Figura 9, el agua purificada intercambia calor con el agua de purga de la caldera en dos etapas. Primero, el intercambiador HE1 precalienta la corriente proveniente del suavizador. El diseño de dicho intercambiador HE1 constituye el objetivo del presente estudio. Luego, esta corriente se envía al precalentador de agua (PHEATER), que permite obtener una corriente (S1) a 393.362 K y 200 kPa. Una bomba adicional (P2) aumenta la presión hasta 800 kPa (corriente S2) para alimentar la caldera de vapor, que se representa mediante la combinación de un intercambiador de calor (CALDERA) y un tanque de evaporación (FBOILER). La corriente S3 es una mezcla de agua saturada y vapor, que se alimenta a FBOILER. El vapor resultante (STEAMP) se utiliza para proporcionar el calor requerido por el proceso (caso nominal: 2.5 GJ / h) mientras que la corriente de condensación (CONDENSE) vuelve a PHEATER.

El agua de purga (SATWATER) transfiere calor sensible al agua ablandada (corriente COLDSoft). Vale la pena mencionar que el agua de purga de la

caldera de vapor se descargará antes de la saturación, es decir, cuando contenga el 95% de las sales que causan los flujos de incrustación.

Los principales compuestos utilizados en el proceso diseñado son agua (H_2O), carbonato de calcio ($CaCO_3$), carbonato de magnesio ($MgCO_3$), bicarbonato de calcio ($CaHCO_3$), bicarbonato de magnesio ($MgHCO_3$) y cloruro de sodio ($NaCl$). A su vez, se considerarán las reacciones secundarias de estos compuestos en el modelo de simulación.

Para corroborar la efectividad del enfoque descrito, es necesario garantizar que la corriente de retorno de condensados y de purga sean líquido saturado, variando el calor a proporcionar en el BOILER y en base a la temperatura de los condensados. Esto se realiza mediante el establecimiento de especificaciones de diseño dentro del simulador. Simultáneamente, de acuerdo a los resultados de la simulación, se evalúa que el modelo reporte datos coherentes con la termodinámica del proceso verificando manualmente los balances de energía.

Se espera que el modelo propuesto permita una reducción en el costo asociado al consumo de energía del proceso (de producción de vapor) debido al aprovechamiento de la energía térmica de la purga de la caldera para precalentar el agua de alimentación a la misma. Sin embargo, el agregar una unidad nueva (el intercambiador HE1) al proceso también implica un costo de inversión. Así, la reducción en costos de operación antes descrita debe de compensar el costo de inversión del intercambiador de calor HE1 propuesto, que dependerá de su tamaño. A su vez, se trabajará con varios escenarios variando el calor requerido por el proceso y producido por la caldera, con la meta de estudiar la robustez del proceso propuesto frente a diferentes posibles condiciones de operación.

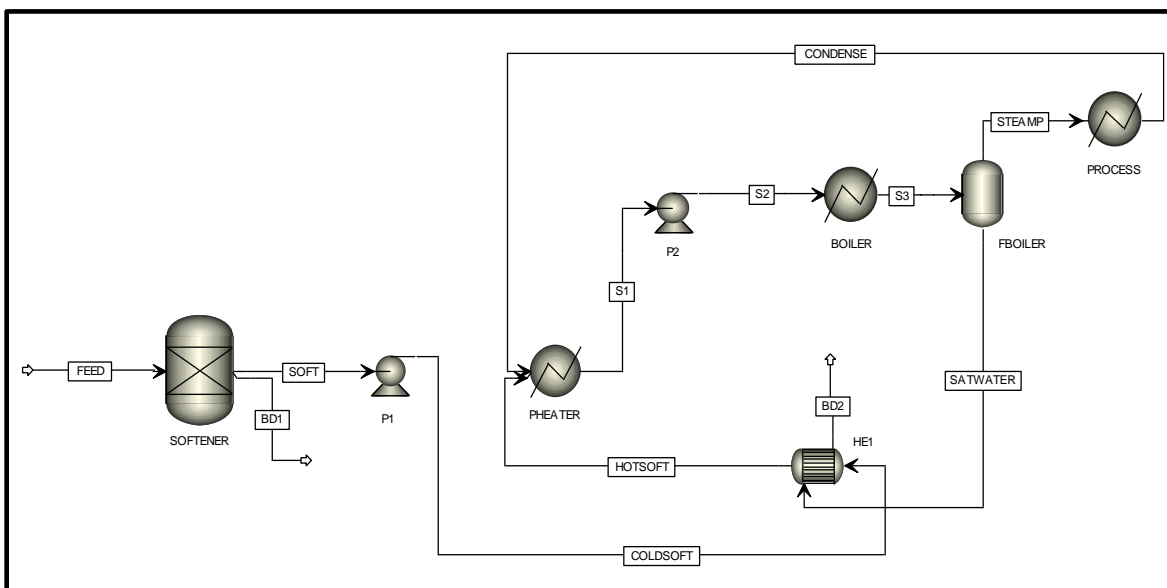


Figura 9. Modelo para la simulación en Aspen Plus V9.1 de un proceso térmico industrial usado para la reutilización térmica de purga de caldera.

3.2 Estrategia general de resolución

El problema planteado en la sección anterior, así como la pregunta de investigación asociada, implican determinar los parámetros de diseño y de operación de los diferentes equipos del proceso, de tal manera que se cumpla con los requisitos de calor a proporcionar y de temperatura de los flujos, a un costo mínimo. Para ello, es necesario, en primer lugar, representar el proceso de interés y, en un segundo tiempo, optimizar sus parámetros.

Un primer enfoque consistiría en desarrollar explícitamente un modelo matemático incluyendo las ecuaciones de balance de masa y de energía, operación de los equipos, reacciones químicas y propiedades termodinámicas involucradas; y posteriormente aplicar un método de Programación Matemática para determinar las características óptimas del proceso. Sin embargo, la formulación de todas las ecuaciones antes mencionadas representa un procedimiento muy largo y complicado, que fácilmente puede ser sustituido por una representación basada en un modelo de simulación. Efectivamente, los simuladores mencionados en el capítulo 2 plantean de manera implícita todas estas ecuaciones, a través de una interfaz gráfica (flowsheet).

Por otro lado, acoplar un modelo de simulación con una técnica de Programación Matemática, aunque factible, es también una estrategia complicada, dada la naturaleza probablemente no-lineal de las ecuaciones.

El requisito de características favorables de las funciones involucradas (continuidad, derivabilidad) y la necesidad de evaluar derivadas mediante procedimientos numéricos costosos (por ejemplo, diferencias finitas) tiende a perjudicar a los métodos matemáticos. Por lo tanto, se propone utilizar técnicas metaheurísticas, que no requieren de estas condiciones restrictivas para trabajar, sino solamente del valor del criterio técnico-económico a optimizar, evaluado en algunos puntos del espacio de búsqueda. Finalmente, acoplar un simulador con una técnica metaheurística, implementada en algún lenguaje de programación, implica el uso de una tercera herramienta, efectuando la interfaz entre los módulos de simulación y de optimización.

Así pues, en primer lugar se define el diagrama de flujo del proceso a través de un simulador (Aspen Plus), dimensionando los equipos utilizados, introduciendo los parámetros de operación (temperatura, composición de la corriente de entrada, etc.) y de diseño (caídas de presión en las unidades de proceso, demanda de calor). Esta rigurosa simulación se utiliza para validar y evaluar diferentes opciones de diseño en el proceso escogido.

En base a ello, se define el problema de optimización a resolver para minimizar los costos. Particularmente, se identifican las variables de decisión, asociadas a los parámetros controlables del proceso que permiten optimizar la función objetivo. Esta función es relacionada con el costo de algunos elementos del proceso (los que cambian con la nueva estructura propuesta). Estos dos elementos (variables y función objetivo) serán manejados por la(s) metaheurística(s) para aproximar la solución óptima.

Entre los dos módulos ya mencionados (simulación y optimización), se utiliza como interfaz de comunicación Excel-VBA. Efectivamente, resulta relativamente fácil la transmisión de información entre Excel-VBA y Aspen Plus. Desde el primero se puede ejecutar el segundo enviándole, mediante palabras claves específicas, los parámetros de operación y de diseño necesarios para la simulación. Una vez ejecutada la simulación, Excel-VBA puede recuperar mediante un procedimiento similar algunas salidas de Aspen Plus, en este caso las características de algunos equipos que permitirán calcular el costo de la configuración evaluada.

Esta estrategia general de resolución se ilustra en las figuras 10 y 11 en donde se observan los flujos de información entre los tres módulos, que sirve para el cálculo de la función objetivo. La metaheurística implementada en Matlab genera una solución (conjunto de variables de decisión) y la envía a VBA para su evaluación. En VBA, se interpretan dichas variables de decisión, transformándolas en parámetros de entrada de la simulación, de acuerdo a las palabras clave utilizadas por Aspen Plus. En Aspen Plus se realiza la simulación, es decir la evaluación real de la solución generada por la metaheurística. Una vez concluida la simulación, el flujo de información es ahora de Aspen Plus hacia VBA: algunos datos de salida obtenidos de la simulación se envían a VBA, el cual los interpreta, almacena y calcula el valor correspondiente de la función objetivo. Este valor de la función de

costo calculado en VBA es enviado a Matlab, lo que permite a la metaheurística tener la retroalimentación necesaria para modificar la solución actual y proponer otra nueva, que será evaluada por Aspen Plus como ya fue indicado. Este ciclo se repetirá hasta que el optimizador (en Matlab) termine la ejecución, típicamente de acuerdo a una cantidad máxima de recursos (iteraciones, tiempo de cómputo, etc.) disponible.

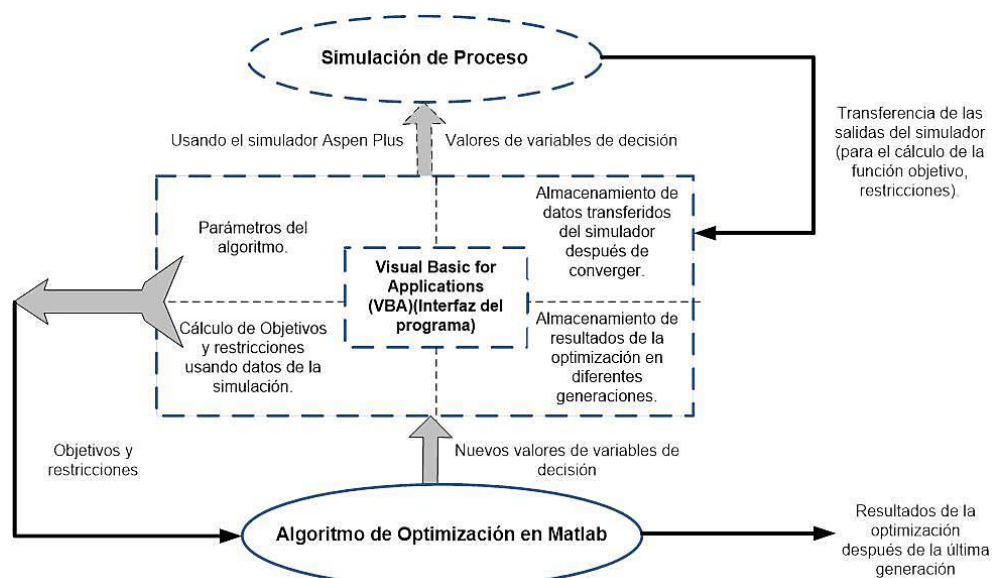


Figura 10. Interfaz entre un simulador de proceso (Aspen Plus) y Excel (contiene un programa de optimización) [5]

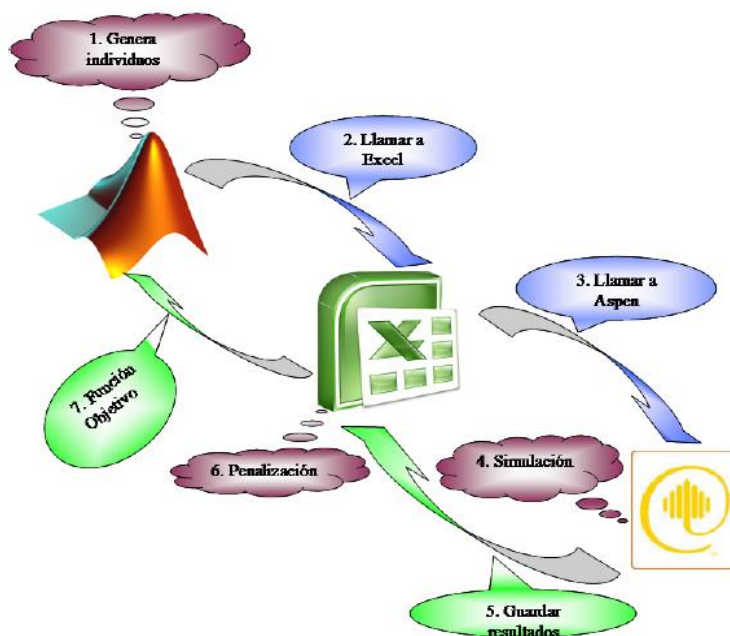


Figura 11. Diagrama representando la estrategia de resolución [55].

Cabe mencionar que se usan Algoritmos Evolutivos desarrollados específicamente en el marco de este proyecto en el ambiente de programación Matlab, debido a su fácil comunicación con funciones (macros) implementadas en Excel-VBA. Nótese

que no se usan los AEs ya disponibles en el “toolbox” de optimización de Matlab, para poder fácilmente controlar sus mecanismos internos.

Las subsecciones siguientes describen a detalle los tres elementos (simulación, optimización, interfaz) que forman parte de esta estrategia general de resolución.

3.3 Simulación

Dado que en este proyecto se trabaja con soluciones electrolíticas, y debido a su amplia gama de bases de datos, la información proporcionada sobre equilibrio de fases, su fácil manejo y su adaptabilidad al problema planteado se eligió trabajar con el software Aspen Plus Versión 9.1 utilizando el modelo termodinámico llamado Elec NRTL que sirve para simular sistemas electrolíticos.

3.3.1 Procedimiento general

En primer lugar, la estructura del proceso (diagrama de flujo de proceso) se diseña en el software computacional Aspen Plus V9.1. Dicha estructura (o flowsheet), enseñada en la Figura 9, se utiliza entonces para generar el modelo de simulación, que incluye ecuaciones de balances de masa y energía, de operación de las unidades, de cálculo de propiedades termodinámicas, etc.

Luego, se especifican los componentes químicos utilizados en el proceso y, mediante la opción Elec Wizard, se cargan las reacciones de electrolisis que se llevan a cabo de acuerdo a los componentes seleccionados. De esta manera, se determinan sus constantes de equilibrio y se identifican las especies iónicas involucradas en la solución, ver figura 12.

Component ID	Type	Component name	Alias
H2O	Conventional	WATER	H2O
CO3--	Conventional	CO3--	CO3-2
NA2CO3	Conventional	SODIUM-CARBONATE	NA2CO3
CA++	Conventional	CA++	CA+2
H3O+	Conventional	H3O+	H3O+
NA+	Conventional	NA+	NA+
CO2	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
HClO	Conventional	HYPOCHLOROUS-ACID	HClO
CAC03(S)	Solid	CALCIUM-CARBONATE-CALCITE	CAC03
CACL2(S)	Solid	CALCIUM-CHLORIDE	CACL2
SODIU(S)	Solid	SODIUM-BICARBONATE	NAHCO3
NACL(S)	Solid	SODIUM-CHLORIDE	NACL
SALT4	Solid	CACL2*2H2O	CACL2*2W
SALT5	Solid	SODIUM-CARBONATE	NA2CO3
SALT8	Solid	SODIUM-CARBONATE-MONOHYDI	NA2CO3.H2O
HCO3-	Conventional	HCO3-	HCO3-
CL-	Conventional	CL-	CL-
SiO2	Conventional	SILICON-DIOXIDE	SiO2
CL2	Conventional	CHLORINE	CL2

Figura 12. Componentes de las reacciones electrolíticas.

Se selecciona el modelo termodinámico para representar las propiedades físicas y químicas de los componentes del proceso, figura 13.

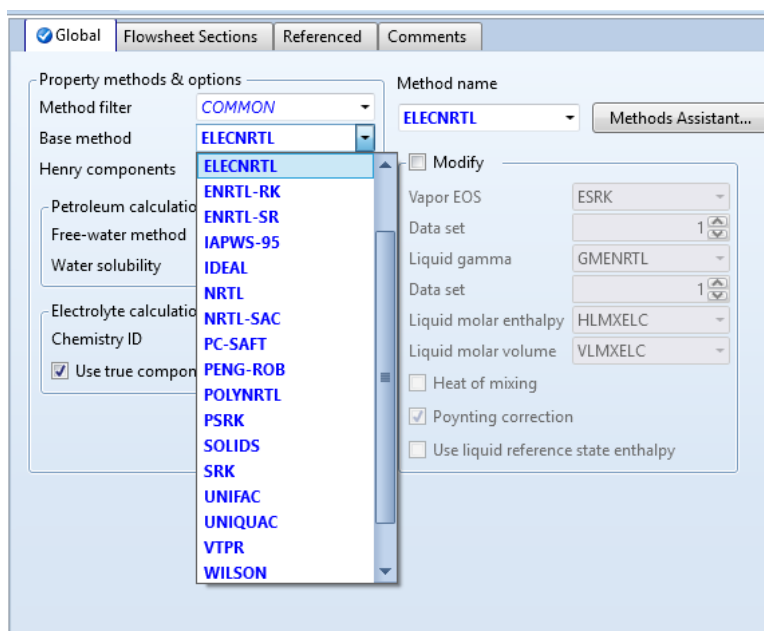


Figura 13. Selección de método termodinámico de trabajo

Las operaciones de las unidades del proceso, como son intercambiadores de calor, bombas de circulación de agua, tanque flash, divisores y mezcladores de flujo, se definen y se fijan sus parámetros de operación.

Se introducen las condiciones y características del flujo de alimentación, así como las condiciones termodinámicas (temperatura, presión, concentración de sales de acuerdo a solubilidades reportadas en bibliografía, etc).

Finalmente, para poder asegurar que la fase del retorno de condensado se encuentre como líquido saturado al igual que el agua de la purga de caldera, se introduce el modelo SPEC (diseño de especificaciones). Este módulo permite imponer una temperatura mínima del retorno de condensados (variable dependiente) como si fuera una restricción y definir sobre qué otra variable (independiente) del proceso se tiene que actuar para cumplir con esta especificación. Aspen Plus ajustará por sí mismo la variable independiente (en este caso, la cantidad de calor a proporcionar en la caldera) para que la condición sobre la variable dependiente se cumpla.

3.3.1.1 Estudio Adicional

Se verifica manualmente que las solubilidades de las sales de alimentación concuerden con las constantes de equilibrio que Aspen Plus reporta. Además, se

hacen pruebas para verificar que el producto de solubilidad varíe efectivamente con la temperatura y con la variación de concentración, ver anexo 3.

3.3.2 Compuestos químicos y solubilidad

Para realizar la simulación propuesta, los componentes químicos utilizados en el proceso son los especificados en la tabla 1.

Tabla 1. Componentes considerados en el proceso

Agua (H ₂ O)
Carbonato de Calcio (CaCO ₃)
Carbonato de Magnesio (MgCO ₃)
Bicarbonato de Calcio (CaHCO ₃)
Bicarbonato de Magnesio (MgHCO ₃)
Cloruro de sodio (NaCl)
Sílice (SiO ₂)
Cloruro de Magnesio (MgCl)
Cloruro de Calcio (CaCl)
Carbonato de Sodio (Na ₂ CO ₃)
Bicarbonato de Sodio (NaHCO ₃)
Sulfato de Magnesio (MgSO ₄)
Sulfato de Calcio (CaSO ₄)
Sulfato de Sodio (Na ₂ SO ₄)
Nitrato de Magnesio (Mg(NO ₃) ₂)
Nitrato de Sodio (NaNO ₃)
Nitrato de Calcio (Ca(NO ₃) ₂)

Mientras que Aspen Plus calcula la solubilidad de las sales mediante la ecuación 9.

$$\ln(keq) = A + \frac{B}{T} + C * \ln(T) + D * T + E * \left(\frac{P - Pref}{Pref} \right) \quad (9)$$

En los sistemas de electrolitos, los solutos de sal se ionizan en solución, fenómeno que se representa mediante la ecuación general:

$$M_{v^+}X_{v^-} = v_+M^{z^+} + v_-X^{z^-} \quad (10)$$

Donde M es un catión de carga z^+ y X es un anión de carga z^- . Para entender el límite en el cual se ioniza una sal, o el límite de su solubilidad, un mejor enfoque consiste en observar su constante de equilibrio. La constante de equilibrio, o producto de solubilidad, de la sal se escribe como:

$$K_q = [M^{z^+}]^{v^+} [X^{z^-}]^{v^-} \quad (11)$$

La constante de equilibrio termodinámico resultante se formula:

$$K_{eq} = a_M^{v+} a_X^{v-} \quad (12)$$

Sustituyendo la definición de actividad se obtiene la siguiente expresión:

$$K_{eq} = [M^{z+}]^{v+} [X^{z-}]^{v-} \gamma_M^{v+} \gamma_X^{v-} \quad (13)$$

$$K_{eq} = K_q \gamma_M^{v+} \gamma_X^{v-} \quad (14)$$

$$K_{eq} = K_q K_r \quad (15)$$

Resolviendo para el producto de solubilidad:

$$K_q = \frac{K_{eq}}{K_r} \quad (16)$$

Por lo tanto, el modelado del producto de solubilidad incluye el equilibrio termodinámico y el equilibrio del coeficiente de actividad para la fase simultánea y el equilibrio químico [10].

Se consideran como viables, en el marco de este trabajo, las composiciones presentadas en la tabla 2.

Tabla 2. Composiciones y solubilidad de sales utilizadas en el proceso descrito

	Alimentación				
Sales	Composición		Temperatura [°C]	Presión [bar]	Valor de la constante A de acuerdo a la ecuación 9
	Sal [kg/h]	Agua [kg/h]			
SALT2 (CaCl2*H2O)	40	5000	25	1	-8.18906
CALCI(s) (CaCl2)	50	5000	25	1	-6.74524
CaCO ₃ (s)	0.08	5000	25	1	-26.14743
SALT1 (MgCl ₂ *H ₂ O)	1.20	5000	25	1	-7.0227989
MgCl ₂ (s)	100	5000	25	1	-4.85798
MgCO ₃ (s)	1.42	5000	25	1	-19.0683
SALT5 (NaHCO ₃)	20	5000	25	1	-7.7423583
SODIU(s) (Na ₂ CO ₃)	40	5000	25	1	-13.989024
NaCl (s)	90	5000	25	1	-4.5511266

3.3.3 Reacciones de equilibrio

De acuerdo a los componentes utilizados, se tienen las siguientes reacciones de equilibrio, tabla 3.

Tabla 3. Reacciones de Equilibrio

Reacción	Tipo	Estequiometria
1	Equilibrio	H ₂ SO ₄ + H ₂ O <--> H ₃ O ⁺ + HSO ₄ ⁻

2	Equilibrio	$\text{HNO}_3 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{NO}_3^-$
3	Equilibrio	$\text{HCL} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CL}^- + \text{H}_3\text{O}^+$
4	Equilibrio	$\text{H}_2\text{O} + \text{HSO}_4^- \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{SO}_4^{--}$
5	Equilibrio	$\text{H}_2\text{O} + \text{HCO}_3^- \leftrightarrow \text{CO}_3^{--} + \text{H}_3\text{O}^+$
6	Equilibrio	$2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 \leftrightarrow \text{HCO}_3^- + \text{H}_3\text{O}^+$
MAGNE(S)	Sal	$\text{MAGNE(S)} \leftrightarrow \text{Mg}^{++} + 2\text{NO}_3^-$
MGCL2(S)	Sal	$\text{MGCL2(S)} \leftrightarrow \text{Mg}^{++} + 2\text{Cl}^-$
MGCO3(S)	Sal	$\text{MGCO3(S)} \leftrightarrow \text{CO}_3^{--} + \text{Mg}^{++}$
CACO3(S)	Sal	$\text{CACO3(S)} \leftrightarrow \text{CO}_3^{--} + \text{Ca}^{++}$
SALT2	Sal	$\text{SALT2} \leftrightarrow \text{SO}_4^{--} + 2\text{Na}^+$
CALCI(S)	Sal	$\text{CALCI(S)} \leftrightarrow \text{Ca}^{++} + 2\text{Cl}^-$
SALT5	Sal	$\text{SALT5} \leftrightarrow \text{HCO}_3^- + \text{Na}^+$
SODIU(S)	Sal	$\text{SODIU(S)} \leftrightarrow \text{CO}_3^{--} + 2\text{Na}^+$
NANO3(S)	Sal	$\text{NANO3(S)} \leftrightarrow \text{NO}_3^- + \text{Na}^+$
CASO4(S)	Sal	$\text{CASO4(S)} \leftrightarrow \text{Ca}^{++} + \text{SO}_4^{--}$
SALT1	Sal	$\text{SALT1} \leftrightarrow \text{Ca}^{++} + 2\text{NO}_3^-$
NACL(S)	Sal	$\text{NACL(S)} \leftrightarrow \text{Cl}^- + \text{Na}^+$
MGSO4(S)	Sal	$\text{MGSO4(S)} \leftrightarrow \text{Mg}^{++} + \text{SO}_4^{--}$
NA2CO3	Disociación	$\text{NA2CO3} \rightarrow \text{CO}_3^{--} + 2\text{Na}^+$
NAHCO3	Disociación	$\text{NAHCO3} \rightarrow \text{HCO}_3^- + \text{Na}^+$
NACL	Disociación	$\text{NACL} \rightarrow \text{Cl}^- + \text{Na}^+$

Las reacciones en equilibrio sólido-líquido son aquellas en las que el sólido consiste en una sal simple. Las reacciones de disociación describen la disociación de electrolitos fuertes en la fase líquida. Estas reacciones no tienen constantes de equilibrio.

Nota: la solubilidad de la calcita (carbonato de calcio, CaCO_3) es fuertemente influenciada por la cantidad de ácido carbónico presente en la solución (es decir la solubilidad de CaCO_3 crece con la concentración de CO_2) [10].

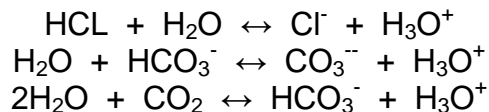
3.3.4 Modelos termodinámicos

El modelo termodinámico utilizado para simular las soluciones electrolíticas involucradas en el sistema es el llamado Elec NRTL y se describe en la sección 3.3.4.1.

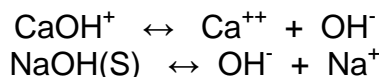
Mientras que el grado de disociación del agua se describe por la constante de equilibrio, K . El agua es un electrólito débil y se disocia de acuerdo con la ecuación neta:



Cuando un electrólito se disuelve en agua, la equivalencia de protones e iones hidroxilo puede ser perturbada, por ejemplo por la introducción de una especie donadora de protones, para producir una solución ácida, como en las reacciones de equilibrio siguientes:



De manera alternativa, la introducción de una especie que acepta protones para producir una solución alcalina implica:



El balance de los iones H^+ y OH^- presentes en una solución puede tener un efecto crítico sobre la solubilidad de una sustancia particular. Por ejemplo, en una solución ácida, el metal de zinc existe como ion Zn^{2+} pero en soluciones aproximadamente neutras se forman especies parcialmente hidrolizadas tales como Zn(OH)^+ y Zn(OH)_2 , siendo esta última insoluble. En cambio, en soluciones alcalinas, se forman los aniones Zn(OH)_3^- y Zn(OH)_4^{2-} , ambos solubles. Por lo tanto, se hace evidente que muchas especies disueltas poseen la capacidad de existir en un número de diferentes formas protonadas o desprotonadas, dependiendo del pH de la solución. Muchas de las especies son solubles (por ejemplo, $\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$, EDTA_4^-), pero otras no lo son (por ejemplo, Zn(OH)_2 , EDTAH_4), por lo que existe la posibilidad de eliminar materiales en forma de precipitados insolubles, alterando la acidez de la solución [10].

Para nuestro caso, se elige el modelo de electrólito generalizado de dos líquidos no aleatorios por sus siglas en inglés ENRTL-RK, diseñado para representar propiedades termodinámicas de diversos sistemas electrolíticos de disolventes mixtos y acuosos abarcando concentraciones de solventes puros a soluciones saturadas de sales.

3.3.4.1 Modelo electrólito NRTL (o eNRTL)

El modelo electrolítico no aleatorio de dos líquidos (eNRTL), propuesto por Chen y Evans (1982), proporciona un marco termodinámicamente consistente para la representación de los equilibrios de fase de los sistemas electrolíticos de disolvente mixto. Usando solo parámetros binarios ajustables, el modelo correlaciona satisfactoriamente el equilibrio líquido-vapor y el equilibrio líquido-líquido de los sistemas de electrolitos de solventes mixtos en todo el rango de temperaturas y concentraciones.

El modelo electrolítico eNRTL postula dos supuestos fundamentales sobre la estructura reticular líquida de los sistemas electrolíticos:

1. La composición local de cationes (aniones) alrededor de un catión central (anión) es cero.
2. La distribución de cationes y aniones alrededor de una molécula central es tal que la carga iónica local neta es cero. [10]

Ejemplos de sistemas electrolíticos incluyen mezcla de agua y sales orgánicas, mezclas de ácido fuerte en agua (como ácido nítrico), aminas orgánicas acuosas para el tratamiento de gases, salmueras con aditivos orgánicos y extracción o cristalización de sales, por nombrar algunos de los principales sistemas. Estos modelos proporcionan marcos termodinámicos rigurosos para calcular diversas propiedades termodinámicas para electrolitos. El modelo electrolítico NTRL utiliza la dilución infinita como el estado de referencia [14].

3.3.4.2 Modelo electrolítico en Aspen Plus

En Aspen Plus, un sistema de electrolitos se define tal que algunas de las especies moleculares se disocian parcial o completamente en iones en un solvente líquido, y/o algunas de las especies moleculares precipitan como sales. Estas reacciones de disociación y precipitación ocurren lo suficientemente rápido como para que las reacciones se puedan considerar como equilibrio químico. Las reacciones de equilibrio en fase líquida que describen este comportamiento se conocen como la química de la solución. En Aspen Plus, la química de la solución a menudo se conoce simplemente como Química.

La química de la solución tiene un gran impacto en la simulación de sistemas de electrolitos. Para sistemas no electrolíticos, las reacciones químicas generalmente ocurren solo en reactores. La química de la solución también afecta los cálculos de propiedades físicas y cálculos de equilibrio de fase. La presencia de iones en la fase líquida causa un comportamiento termodinámico altamente no ideal. Aspen Plus proporciona modelos termodinámicos especializados y datos incorporados para representar el comportamiento no ideal de los componentes de la fase líquida para obtener resultados precisos. Los tipos de componentes electrolíticos son:

- Disolventes
- Solutos
- Iones
- Sales

Mientras que los tipos de reacciones en química de solución electrolítica son:

- Disociación completa
- Disociación parcial (reacción de equilibrio)
- Precipitación de sal (reacción de equilibrio) [10]

Aspen puede regresar los datos de solubilidad y luego calcula un valor para el producto de solubilidad (K_{sp} o K_{eq}) en función de la temperatura, mientras que los

datos de solubilidad real de un sistema mixto de sal incorporan las constantes de equilibrio termodinámico y de actividad. Aspen usa el algoritmo Britt-Luecke [25] para ajustar los datos a una constante de equilibrio de la forma:

$$\ln K_{eq} = A + B/T + C \cdot \ln(T) + D \cdot T$$

Dónde:

K_{eq} =constante de equilibrio.

T =Temperatura en Kelvin.

A, B, C, D = Coeficientes.

Las ventajas de utilizar la química de electrolitos son los siguientes:

1. Pueden ser simulados automáticamente mediante la opción "Electrolytes Wizard".
2. Obtienen datos de las constantes de equilibrio sin tener que realizar análisis experimentales [10].

3.3.5 Operaciones Unitarias involucradas

La composición del flujo de entrada se define en la tabla 4, su caudal depende de la cantidad de vapor que necesite el proceso por eso este variará de acuerdo a la demanda del proceso y será calculado mediante una simulación preliminar con análisis de especificaciones (ver anexos). Cabe mencionarse que el sistema de agua está sujeto a los niveles de concentración, ya que estos deben de ser menores a la saturación de sales.

Tabla 4. Composición de alimentación del modelo de simulación

Equipo Suavizador de Agua (bloque SOFTENER)		
Alimentación: 5 000 kg/hr	Presión: 1 bar	Temperatura: 25°C
Flujo másico [kg/h]:	$\dot{m}_{NaCl} = 90$ $\dot{m}_{MgCl} = 10$ $\dot{m}_{CaCl} = 5$ $\dot{m}_{Na_2CO_3} = 4$ $\dot{m}_{NaHCO_3} = 2$ $\dot{m}_{CaCO_3} = 0.08$ $\dot{m}_{MgCO_3} = 1.4$ $\dot{m}_{SiO_2} = 0.02$ $\dot{m}_{NaNO_3} = 4$ $\dot{m}_{Na_2SO_4} = 4$ $\dot{m}_{Mg(NO_3)_2} = 5$ $\dot{m}_{MgSO_4} = 2.5$ $\dot{m}_{Ca(NO_3)_2} = 0.12$ $\dot{m}_{CaSO_4} = 0.03$	

En la Tabla 5 se presenta una descripción de las operaciones unitarias consideradas, así como una descripción de los parámetros y corrientes utilizadas

representadas en la Figura 9, además se describen los módulos correspondientes y sus parámetros (subsección 3.3.6).

Tabla 5. Definición de corrientes y equipos mostrados en la figura 9.

Equipo	Definición
SOFTENER	Bloque que representa a un equipo suavizador de agua, en este ejemplo es el encargado de ablandar el agua de alimentación a proceso.
P1	Bomba que impulsará el flujo proveniente de SEP1 hacia el pre calentador de agua.
HE1	Intercambiador de calor que incrementa la temperatura del agua suavizada mediante el aprovechamiento de la energía térmica de la purga.
PHEATER	Intercambiador de calor que sirve como pre calentador del agua suavizada la cual eleva la temperatura hasta 120°C.
P2	Bombeo de agua caliente proveniente del equipo PHEATER de 2 bares hasta 8 bares.
BOILER	Caldera 1 la cual opera a 8 bar y produce 3.25 Gcal/h de vapor (este calor varía).
FBOILER	Tanque Flash en donde se efectúa la separación de fases.
PROCESS	Intercambiador de calor que representa el calor requerido por el proceso.
FEED	Es la línea de alimentación principal al proceso proveniente directamente del pozo de la empresa.
SOFT	Esta corriente contiene el agua suavizada que es mandada como alimentación a la caldera.
BD1	Es el agua de rechazo del suavizador debida a regeneraciones del equipo suavizador.
COLDSoft	Agua suavizada a temperatura ambiente la cual intercambiará energía térmica con el agua de purga (SATWATER).
HOTSoft	Agua suavizada caliente alimentación al equipo pre calentador (PHEATER).
BD2	Agua caliente, saturada de sales provenientes de la purga de caldera, mandada directamente al drenaje.
SATWATER	Agua previa a saturación de sales purgada de caldera.
S1	Agua caliente a presión de 2 bar.
S2	Agua caliente bombeada para alimentación a calderas (8 bar).
S3	Mezcla liquido vapor de agua, producida en caldera.
STEAMP	Vapor producido por la caldera.
CONDENSE	Línea de retorno de condensados.

3.3.6 Bloques utilizados en Aspen Plus

A continuación se describen los bloques principales utilizados en este proyecto.

3.3.6.1 SOFTENER (Suavizador)

En este bloque se especifica la fracción de separación de cada sal de alimentación tal como en la tabla 6.

Tabla 6. Fracciones de separación para el suavizador

ID del Componente	Especificación	Valor
H ₂ O	Split fraction	0.98
NACL(S)	Split fraction	0.01
MGCL ₂ (S)	Split fraction	0.02
CALCI(S)	Split fraction	0.02
SODIU(S)	Split fraction	0.02
SALT5	Split fraction	0.02
MGCO ₃ (S)	Split fraction	0.02
CACO ₃ (S)	Split fraction	0.02
SIO ₂	Split fraction	1
MGSO ₄ (S)	Split fraction	0.01
SALT1	Split fraction	0.01
CASO ₄ (S)	Split fraction	0.01
NANO3(S)	Split fraction	0.01
SALT2	Split fraction	0.01
MAGNE(S)	Split fraction	0.01

3.3.6.2 HE1 (Intercambiador de calor de carcasa y tubos)

Se emplea un intercambiador de calor de carcasa y tubos, especificando un valor inicial del área de intercambio térmico, así como la temperatura mínima de aproximación, Figura 14. Cabe mencionar que el valor inicial del área es posteriormente modificado por los algoritmos utilizados a través de Matlab con interfaz Excel-VBA en el transcurso de la optimización.

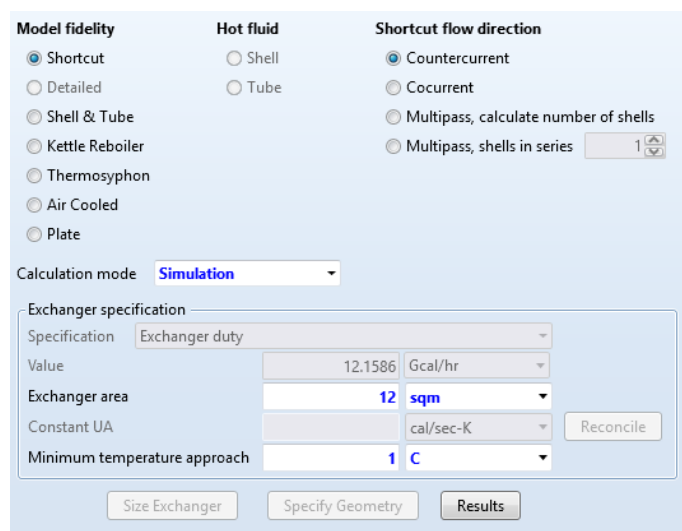


Figura 14. Propiedades bloque HE1

3.3.6.3 PHEATER (Pre calentador de agua)

Para precalentar el agua de alimentación a la caldera se utiliza un intercambiador de calor, en el que se especifica la presión deseada y acorde a esto mediante la herramienta “Especificación de Diseño” se calcula el calor necesario que necesita este equipo, figura 15.

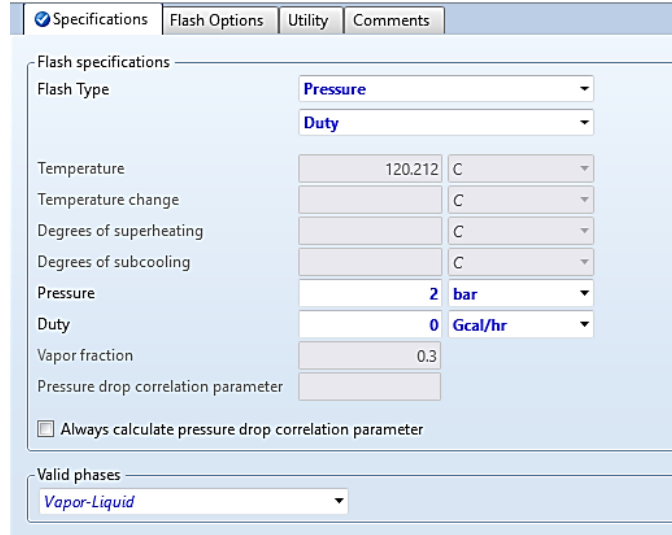


Figura 15. Características equipo pre calentador de agua

3.3.6.4 Caldera

a) BOILER

Para representar la caldera se utilizan dos bloques, en el primero se especifica el calor a producirse en la caldera de acuerdo a la presión establecida, imagen 16 y el segundo se describe en el inciso b.

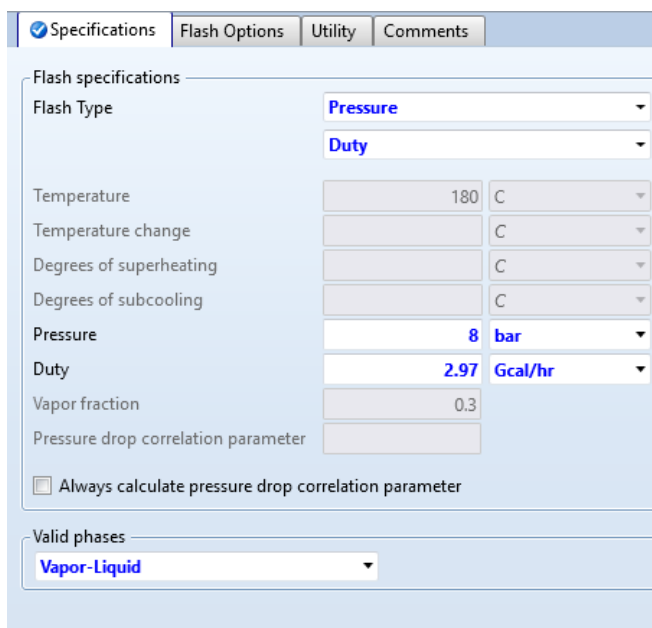


Figura 16. Especificaciones de la caldera

b) FBOILER (Equipo separador de fases adaptado a la caldera)

Este bloque tiene como función llevar a cabo la separación de fases por lo que se considera adiabático con presión de cero, eligiendo como fases válidas liquido-vapor, Figura 17.

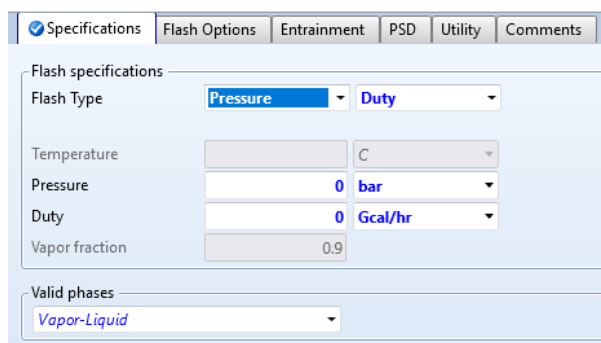


Figura 17, Descripción del bloque FBOILER

3.3.6.5 PROCESS

Este bloque representa el consumo de energía por el proceso, en el que se especifica el consumo de calor requerido por el proceso según sea el escenario analizado, en la Figura 18 se observa que el calor introducido es 2.5 Gcal/hr.

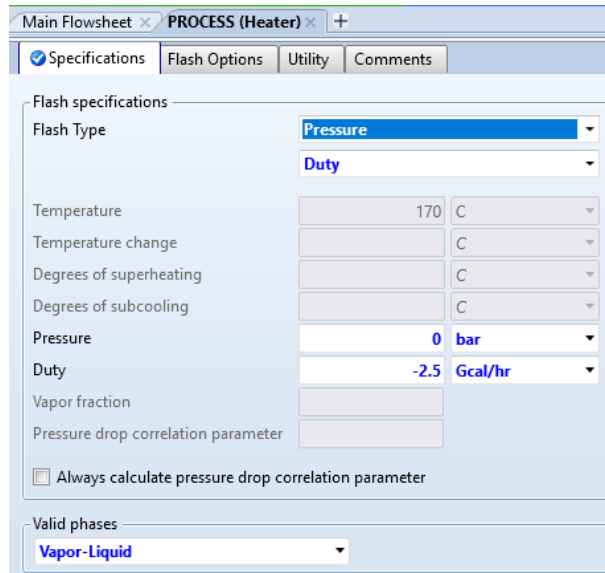


Figura 18. Configuración del bloque PROCESS

3.3.7 Módulo Especificaciones de Diseño (SPEC)

Como se mencionó previamente, se necesita garantizar que el agua a la salida de la caldera (tanto en la corriente de purgado como en la corriente de retorno de condensados) se encuentre como líquido saturado.

Por otro lado, se requiere establecer el calor a proporcionar al proceso por el módulo PROCESS y este calor de alimentación dependerá de la demanda térmica que requiere dicho proceso. Esta última condición se puede imponer indicando una segunda especificación de diseño, en el módulo correspondiente (módulo BOILER) que el calor cedido es igual al requerido por el proceso. En dicho módulo, se fija la temperatura mínima de la corriente de condensados con el proceso en 160°C (esta temperatura permite asegurar que la corriente asociada es formada exclusivamente por líquido saturado, aunque sea posible que contenga las sales presentes en el agua de alimentación en forma de precipitados).

Para garantizar esta condición, se necesita definir una especificación de diseño en la cual se establece una variable independiente, que Aspen Plus puede variar para cumplir la condición de la especificación. En este caso, se eligió el calor producido por la caldera. En el módulo correspondiente (BOILER), se indica un valor inicial aleatorio para que, posteriormente, el solver de Aspen Plus ajuste dicha cantidad de calor de tal manera que se cumpla la condición sobre la temperatura de los condensados, ver anexo 4.

Para este proyecto a una presión de 2 bar le corresponde una temperatura de 120.212°C según tablas de vapor, por lo que se varía la cantidad de calor de que necesita producir este equipo, de -2 a 0.5 Gcal/hr, según la variación del área del intercambiador HE1, Figura 20.

Estos dos aspectos se muestran en la Figura 19, en la parte izquierda se define la variable dependiente (sobre la cual se especifica una condición), mientras que del lado derecho se describe la variable independiente, i.e. el calor producido por la caldera, con un rango de variación aceptable dentro del cual Aspen Plus puede manipularlo.

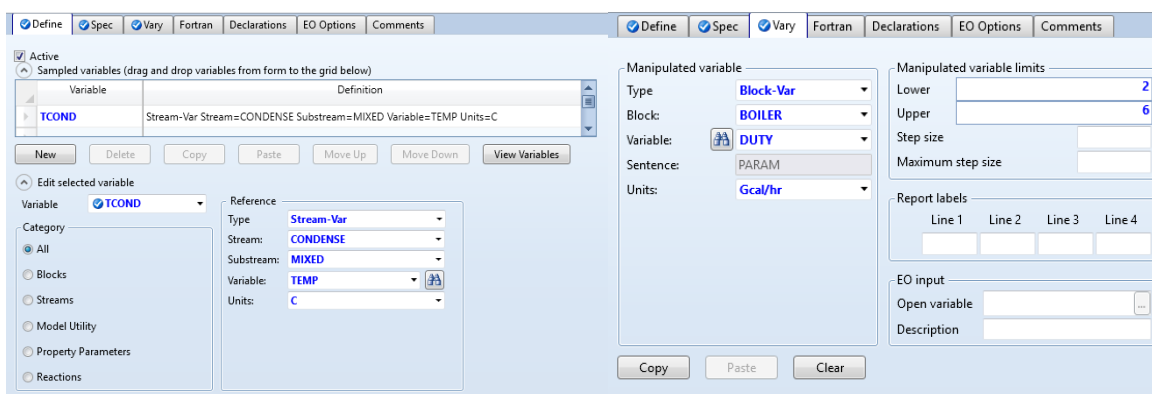


Figura 19. Módulo Especificaciones de Diseño para asegurar líquido saturado en la corriente CONDENSE.

Por otro lado, otro aspecto surgió haciendo pruebas preliminares, relacionado con el precalentador PHEATER. EL papel de esta operación es precalentar el agua saliendo de la unidad de tratamiento antes de mandarla a a caldera. Resulta, sin embargo, que al integrar el nuevo intercambiador HE1, el agua llega a PHEATER en condiciones de temperaturas mayores a las que se suelen especificar para dicho módulo (para este proyecto a una presión de 2 bar le corresponde una temperatura de 120.212°C según tablas de vapor).

En realidad, este escenario es positivo, e implica que la caldera tendría que proporcionar una cantidad menor de calor al agua. Sin embargo, por cuestiones de sencillez de implementación, se decidió recuperar el calor en PHEATER para que el agua salga a la temperatura establecida previamente (120.212°C) y se vuelva a calentar en la caldera. Así, en caso de que el agua llegue a PHEATER con una temperatura mayor a 120.212°C, el calor se recupera (con un valor negativo) e impacta negativamente los costos de operación.

La implementación de esta condición fue realizada con un segundo módulo SPEC, en el cual la variable dependiente es la temperatura del flujo saliendo de PHEATER (S1), sobre la cual se impone la condición de ser al igual a 120.212°C. La variable independiente, controlada por el módulo de especificación de diseño (entre las cotas de -2 a 0.5 Gcal/hr), es la cantidad de calor proporcionada por el precalentador PHEATER. Este procedimiento se ilustra en la Figura 20.

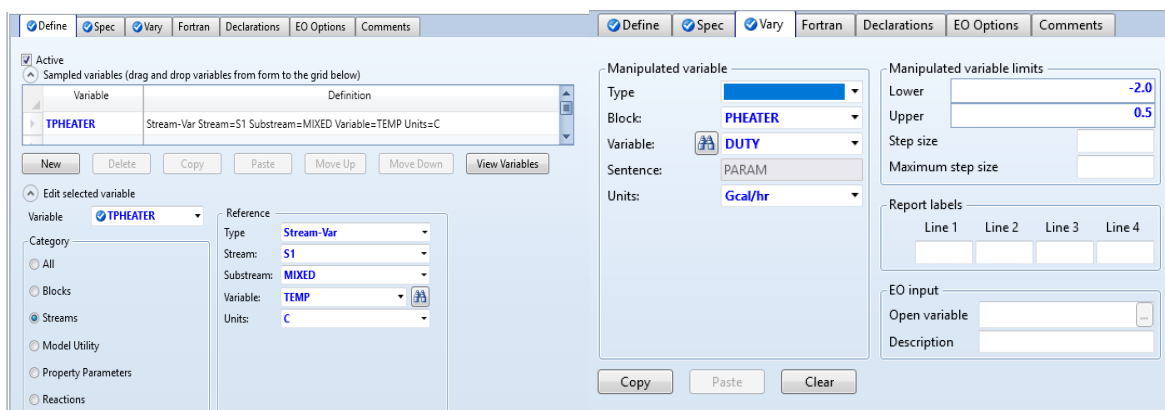


Figura 20. Módulo especificación de diseño para el cálculo del calor requerido en PHEATER

3.4 Optimización

El modelo de simulación descrito en la sección anterior implica ciertos grados de libertad, aunque éstos son pocos debido a las condiciones de diseño y operación ya fijas de varios elementos del proceso total. Esta sección presenta primero la selección de aquellos que serán considerados como variables de decisión, en el contexto del problema de optimización buscando la minimización de los costos del proceso. Posteriormente, se define la formulación de la función objetivo y, adicionalmente, se propone una metodología para estudiar la sensibilidad y robustez del diseño determinado, frente a la variación de cierto(s) parámetro(s) operativo(s) o requisito(s). Finalmente, se describe brevemente la implementación de los Algoritmos Evolutivos elegidos para resolver el problema de optimización asociado al modelo desarrollado en Aspen Plus.

3.4.1 Variables de decisión

Para este estudio, el único parámetro de diseño o de operación no conocido es el área de transferencia del intercambiador propuesto (intercambiador HE1). Su impacto será reducir la cantidad de calor a proporcionar en el bloque PHEATER y por tanto en el bloque BOILER. Todos los demás parámetros de operación están fijos, exceptuando el calor producido en la caldera y el caudal del flujo de entrada al proceso.

Sin embargo, dado que Aspen Plus ajusta directamente la cantidad de calor en el BOILER para cumplir con la especificación sobre la temperatura del retorno de condensados, permitiendo que éstos correspondan a la fase de líquido saturado (ver sección anterior), no es necesario abarcar este sub-problema en el problema de optimización general de costos.

Por otro lado, el caudal de agua de alimentación se determina en base a una especificación de diseño. Por lo tanto, este parámetro tampoco puede considerarse como una variable de decisión del problema de optimización.

Así la única variable de decisión considerada en el problema de optimización es el área del intercambiador HE1. Al determinar esta variable, y ajustando los demás parámetros como ya fue descrito, el resto del sistema está completamente determinado.

3.4.2 Definición del Problema de optimización

En base a la hipótesis del proyecto, se integra un intercambiador que precalienta el agua de alimentación al proceso (agua suavizada) a través de la energía sensible del agua de la purga de caldera. El objetivo es que con esto se reduzcan los costos totales de energía. Cabe mencionar que varios elementos no cambian entre el proceso original, es decir sin ahorro de energía (sin la colocación de un intercambiador de calor) y el proceso con ahorro mediante la colocación del intercambiador HE1. Dado que se quiere comparar ambas opciones, aquellos elementos que no cambian no se toman en cuenta y, por lo tanto, lo único que varía es: el costo para calentar el agua en los equipos PHEATER y BOILER y el costo de inversión asociado a HE1, que depende directamente de su área.

Por lo tanto, la función objetivo definida en este proyecto minimiza los costos, tanto de operación anuales para el equipo PHEATER ($Cop^{PHEATER}$) y BOILER (Cop^{BOILER}), como el costo de inversión para la colocación del intercambiador de calor HE1 ($Cinv^{HE1}$). Sin embargo, estos dos valores no son comparables en el estado, ya que los primeros son anuales, mientras que el último se realiza en una fecha puntual. Por lo tanto, los costos de inversión asociados al intercambiador HE1 son anualizados sobre un horizonte arbitrariamente fijado a 10 años. Así, el costo total anual (TAC) a minimizar se calcula como indicado en la ecuación 17:

$$TAC = Cop^{PHEATER} + Cop^{BOILER} + Cinv_{yr}^{HE1} \quad (17)$$

El costo de inversión $Cinv^{HE1}$ anualizado se formula, considerando una tasa de interés i fijado a 10 años, ecuación 18:

$$C_{inv} = \sum_{n=1}^{yr=10} \frac{Cinv_{yr}^{HE1}}{(1+i)^n} \quad (18)$$

Donde $Cinv$ representa el costo de inversión de capital correspondiente a HE1, obtenido de la ecuación 19:

$$C_{inv} = \sum_{i=1}^{i=M} C_{e,i,AC} [(1+fp)fm + (fer + fel + fi + fc + fs + fl)] \quad (19)$$

Dónde:

C_e = Costo total dentro de los límites de batería

fm = Factor del material

Fp = factor de costo e instalación de tubería

F_{er} = factor de instalación del equipo
 F_{el} = factor de costo e instalación de componentes eléctricos
 F_i = factor de costo e instalación de equipo de instrumentación y control
 F_c = factor de costo de obra de ingeniería civil
 F_s = factor de costo y construcción de estructuras y edificios
 F_l = factor de instalación de recubrimientos, aislamientos y pinturas.

El área de intercambio A se expresa en m^2 . Las cotas planteadas en este trabajo sobre el área son $A \in [4.0, 100]$ en m^2 . Estas cotas se establecen en base a mayor aprovechamiento de energía térmica, teniendo en cuenta consideraciones de espacio en planta.

Por otro lado, los costos anuales de precalentamiento están dados en las ecuaciones 20 y 21:

$$C_{op}^{PHEATER} = Q^{PHEATER} CFH \quad (20)$$

$$C_{op}^{BOILER} = Q^{BOILER} CFH \quad (21)$$

$Q_{PHEATER}$ y Q_{BOILER} son los calores respectivamente requeridos por los módulos PHEATER y BOILER, para alcanzar las condiciones de temperatura y presión deseadas para el agua de alimentación a calderas. Nótese que estos calores ($Q_{PHEATER}$, $Q_{PHEATER}$) son obtenidos de la simulación.

Asimismo, CF es el costo de combustible y H es el número de horas de trabajo anuales ($H = 6000$ hrs/año). La minimización del costo total anual (TAC) es sujeta a las condiciones de operación y diseño implementadas en el modelo de simulación descrito en la sección anterior.

Finalmente, el problema de optimización considerado en este proyecto se puede formular como sigue:

Min	TAC
Sujeto a	Ecuaciones de balance de masa/energía Ecuaciones de funcionamiento de las operaciones unitarias Modelo termodinámico Reacciones de equilibrio Temperatura de Condensados ≥ 160 °C (esta temperatura es la mínima necesaria para que la corriente de condensados y agua de purga permanezca como líquido saturado) $T(S1) = 120.212^\circ C$ $Q_{process} = 2.5$ Gcal/hr (este valor es definido en la sección 3.3.7 y depende del escenario tratado en la siguiente sección)

$$A_{inf} \leq A \leq A_{sup}$$

3.4.3 Escenarios

En esta sección, se propone un estudio adicional, cuya meta es determinar la sensibilidad de la solución encontrada resolviendo el problema de optimización definido anteriormente, en caso de que varíen algunos parámetros de operación del proceso. Dicho de otra manera, se desea estudiar la robustez de la solución encontrada, bajo diferentes escenarios. Se analizan 3 escenarios principales relacionados con el cambio en el calor demandado por el proceso es decir variando el calor producido por el boiler para satisfacer la variación de energía demandada por el proceso.

- a) Primer escenario calor del proceso de 2.5 Gcal/hr
- b) Primer escenario calor del proceso de 4.5 Gcal/hr.
- c) Primer escenario calor del proceso de 6.5 Gcal/hr.

Se decide variar este parámetro ya que, al realizar un análisis de sensibilidad, es este el que tiene un impacto directo sobre la solución del problema.

La variación de este parámetro permite evaluar la robustez de la solución propuesta: si la solución de esta optimización no presenta una variación significativa al cambiar los parámetros, significa que la solución es robusta, es decir de buena calidad para diferentes configuraciones. Si, al contrario, se notan cambios considerables en el área óptima, entonces podría ser necesario tomar en cuenta este parámetro como inciertos y trabajar con un modelo estocástico (esta pauta constituye una de las perspectivas para trabajo futuro).

3.5 Implementación de los algoritmos de resolución

Por los motivos desglosados en el capítulo anterior, se decidió resolver el problema de optimización considerado con técnicas metaheurísticas (la aplicación de métodos de Programación Matemática resultaría complicada en nuestro caso). Particularmente, el interés se enfocó hacia dos Algoritmos Evolutivos, Estrategias Evolutivas (ES) y Evolución Diferencial (ED), que demostraron su habilidad para resolver eficientemente problemas de optimización continua (variables reales), en contextos y aplicaciones diferentes. Dado que ninguna de estas dos técnicas garantiza la optimalidad de la solución encontrada, se podrán comparar sus resultados respectivos para corroborar la mejor solución identificada.

Aunque ambos algoritmos desarrollados en este proyecto son relativamente canónicos, algunos detalles de su implementación, realizada en Matlab 2015, se describen a continuación.

Desde el software Matlab, se inicializa el primer individuo (ES) o la primera población (ED) de manera aleatoria (generando un valor uniformemente distribuido

en el rango asociado al área del intercambiador HE1). Para cada prueba, se utiliza una semilla específica y reportada para controlar la generación de números aleatorios. Se utiliza la siguiente ecuación para generar la variable área (A) en su rango de definición:

$$A = A_{\min} + (A_{\max} - A_{\min}) * \text{rand}() \quad (22)$$

Donde:

$A_{\min}=4.0 \text{ m}^2$ y $A_{\max} = 100 \text{ m}^2$ son las cotas establecidas para A y $\text{rand}()$ es un número aleatorio uniformemente distribuido entre 0 y 1.

Nótese que ambos paradigmas (ES o ED) son diseñados para trabajar con variables reales, sin necesidad de codificación de las mismas. Sin embargo, los operadores usados en cada técnica son susceptibles de producir valores de la variable fuera de su rango de definición. Por lo que para ello es necesario reparar algunos parámetros de los algoritmos utilizados. Si el valor de A producido por una metaheurística es mayor a A_{\max} o menor a A_{\min} , se elige de forma probabilista entre dos opciones de reparación. La primera consiste en volver a generar aleatoriamente un valor válido como indicado en la ecuación 22. La segunda es fijar la variable en el valor de la cota violada: si $A < A_{\min}$, entonces $A = A_{\min}$, y si $A > A_{\max}$, entonces $A = A_{\max}$.

Cabe mencionar que no se puede permitir aplicar demasiado frecuentemente el segundo mecanismo, ya que implicaría que muchas soluciones tendrían el valor de una de las cotas, ocasionando una pérdida de diversidad que podría perjudicar al proceso de búsqueda. Por lo tanto, se aplica esta estrategia con una probabilidad baja, llamada “crit_rep” (entre 1% y 5%). crit_rep se vuelve así un parámetro de control del algoritmo: cuando una variable viola una cota, se saca un número aleatorio $\text{rand}()$. Si $\text{rand}()$ es menor crit_rep se aplica el segundo mecanismo, de lo contrario se usa el primero.

Es de mencionarse que la versión utilizada en este proyecto de ED es la $\text{rand}/1/\text{bin}$. Los parámetros de operación a calibrar para cada algoritmo son, para ES, la desviación estándar (tamaño de paso) inicial (después se ajusta con la regla del 1/5 de éxito), el número de iteraciones entre ajustes (la frecuencia con la que se actualiza el tamaño de paso) y el criterio de reparación (crit_rep). En cuanto a ED, se ajusta la tasa de cruce CR y el factor de amplificación F, así como el tamaño de población y el número de generaciones (de tal manera que se cumpla cierto número de evaluaciones del objetivo, es decir de simulaciones). Para ambos algoritmos, los ajustes se realizaron en base a varias corridas efectuadas con diferentes valores para la semilla de inicialización de la secuencia de números aleatorios.

3.6 Interfaz utilizada

La interfaz de proceso Excel – Visual Basic for Applications (VBA) es usada para llamar a una simulación con un simulador desde otra aplicación. En el caso del

presente proyecto, permite relacionar los dos Algoritmos Evolutivos implementados en Matlab con ASPEN Plus para intercambiar información (variables de decisión enviadas por los AEs, que recuperan el valor de la función objetivo desde Aspen Plus). Además, permite eventualmente guardar las salidas del proceso en Excel para un posterior análisis [23].

3.6.1 Excel - Visual Basic for Application (VBA)

Visual Basic para Aplicaciones (VBA) es una implementación de Microsoft Visual Basic que está integrada en todas las aplicaciones de Microsoft Office. VBA se puede utilizar para personalizar e integrar rápidamente otros softwares con datos existentes.

Excel VBA tiene la capacidad de importar datos desde otras aplicaciones dentro de Excel y desde bases de datos externas a la hoja de cálculo. Hay cuatro operaciones fundamentales de manipulación que se pueden realizar en una fuente de datos. Estos son: recuperar datos existentes, agregar nuevos datos, modificar datos y eliminar datos.

Además, proporciona un entorno de desarrollo integrado completo (IDE) que ofrece los mismos elementos que usan Microsoft Visual Basic, incluidos la ventana de proyecto y propiedades, y las herramientas de depuración. VBA también incluye soporte para Microsoft Forms, para crear cuadros de diálogo personalizados y controles ActiveX, construyendo interfaces de usuario.

VBA se puede usar para crear una función definida por el usuario (UDF) para usar en un libro de trabajo de Microsoft Excel. Un programa escrito en Excel VBA (Macro) puede consistir en reglas, hechos y objetos. El sistema Excel - VBA puede integrarse con otros sistemas, como bases de datos, simuladores como Aspen Plus, sistemas de información existentes u otros subsistemas.

Las ventajas de utilizar el sistema Microsoft Excel – VBA son:

1. Las bases de datos se pueden construir fácilmente usando hojas de cálculo en Excel.
2. La posibilidad de realizar cálculos rápidamente con hojas de cálculo de Excel.
3. VBA tiene la capacidad de desarrollar interfaces sencillas y fáciles de usar que proporciona una forma efectiva de comunicación entre el programa y el usuario.
4. Microsoft VBA está ampliamente disponible ya que está integrado en todas las aplicaciones de Microsoft Office.
5. La depuración del código en VBA es mucho más fácil que muchas otras lenguajes de programación / herramientas de sistemas expertos.
6. La posibilidad de integrar otro software como Aspen Plus, el cual puede personalizarse con VBA [5].

3.6.2 Aspen Plus – Excel - VBA

Como ya se mencionó anteriormente, Excel-VBA recibe en primer lugar una solicitud de evaluar la función objetivo (costos totales) desde el AE implementado en Matlab, para un valor específico del área de HE1. VBA envía por lo tanto una orden de ejecución a Aspen Plus, especificando el valor del área de intercambio del HE1 mediante la palabra clave "HX_AREAP". Cuando concluye la simulación en Aspen Plus, VBA solicita a este último el valor de los parámetros de salida que le permitirán calcular la función objetivo, i.e. los costos totales. Los parámetros requeridos son, este caso, las cantidades de calor producidas en el pre calentador (PHEATER) y en la caldera (BOILER). Estos parámetros se recuperan mediante las palabras clave "QCALC" de cada equipo respectivamente. Posteriormente, en VBA se realiza el cálculo de la función objetivo, mediante las ecuaciones 17 a 21.

Finalmente, este valor es el que se reenvía al AE implementado en Matlab, como resultado de la evaluación de la solución generada, para más información sobre los códigos de programación ver anexo 5.

CAPÍTULO 4

Ajuste de parámetros

Como se mencionó en el capítulo anterior, el desempeño de los algoritmos evolutivos tiende a ser relativamente sensible al valor de los parámetros de operación. Por lo cual, esta sección presenta primero una fase en la que los algoritmos fueron calibrados a través diferentes análisis de sensibilidad. Posteriormente, se enseñan los resultados definitivos y su interpretación.

Se presenta en esta sección el ajuste de los parámetros de operación de los dos algoritmos evolutivos descritos en el capítulo anterior. Estos parámetros pueden tener un impacto significativo sobre el desempeño de los algoritmos, por lo que esta fase preliminar es necesaria para garantizar los mejores resultados posibles (presentados en la siguiente sección). En esta sección, los experimentos

computacionales se realizaron usando un valor de 2.5 Gcal/h para el calor requerido por el proceso. Los resultados completos y graficados están disponibles en el Anexo1.

4.1.1 Estrategias evolutivas

Para el algoritmo de Estrategias Evolutivas, los parámetros a ajustar son:

- (1) el parámetro *iter*, que denota la frecuencia (en número de generaciones) con la que se actualiza el tamaño de paso (desviación estándar) de la perturbación;
- (2) el parámetro *e*, que denota el valor inicial del tamaño de paso y
- (3) la probabilidad de reparación (*crit_rep*, ver capítulo anterior), sobre el uso de las técnicas de reparación en caso de que una variable salga de su rango de variación (re-inicialización aleatoria o valor de la cota violada).

Se tomaron en cuenta los siguientes posibles valores:

- Parámetro *iter*: 3,5, 10
- Parámetro *crit_rep*: 0.01, 0.05, 0.1
- Parámetro *e*: 0.1, 0.5

Otro parámetro a ajustar es el número de generaciones durante las que se ejecuta el algoritmo. Para las Estrategias Evolutivas, este número de generaciones define también el número de evaluaciones de una solución. Efectivamente, en cada generación, sólo se genera una solución candidata, implicando una simulación con Aspen Plus para calcular el valor de la función objetivo correspondiente. El número de generaciones tiene por lo tanto un impacto directo sobre el uso de los recursos computacionales (tiempo y memoria). Con tal de limitar el uso de dichos recursos, se usaron aquí 150 generaciones, es decir que se calculan 150 simulaciones.

Este número fue determinado mediante corridas preliminares, que permitieron establecer que este número de evaluaciones del objetivo es suficiente para obtener, en una mayoría de casos, la convergencia hacia una misma solución.

Finalmente, cabe recordar aquí que los algoritmos evolutivos son técnicas de optimización estocásticas, es decir que, debido al uso de números aleatorios, dos ejecuciones distintas pueden arrojar resultados diferentes. Es por lo tanto necesario realizar varias ejecuciones del algoritmo para obtener resultados estadísticos que permitan elegir el juego de parámetros más adaptado. En este caso, se realizaron 10 corridas por combinación probada de parámetros, cada una con una semilla específica y controlada del generador de números aleatorios. Los resultados obtenidos se presentan en la tabla 7, que indica, para cada juego de parámetros, algunos estadísticos sobre las 10 ejecuciones efectuadas. Nótese que sólo se eligieron 6 combinaciones de valores para los parámetros antes mencionados.

Tabla 7. Ajuste de parámetros para 10 corridas con 150 generaciones

#	Ajuste Parámetros			Resultados				
	<i>iter</i>	<i>e</i>	<i>crit_rep</i>	\bar{X}	σ	LS (Mejor resultado)	LI (peor resultado)	Tiempo total de ejecución [s]

1	3	0.1	0.01	557380	5459.30	545570	547040	11904.614
2	5	0.1	0.01	548080	4784.30	545610	559800	11184.242
3	5	0.1	0.05	547480	2730.20	545930	554210	11867.465
4	5	0.5	0.05	545910	118.52	545700	546170	12445.370
5	10	0.1	0.1	545889	106.25	545650	545981	14532.763

Dónde:

\bar{x} : valor promedio del costo total obtenido, calculado en base a las 10 ejecuciones.

σ : desviación estándar del costo total obtenido, calculada en base a las 10 ejecuciones.

LS: valor superior obtenido de los valores de los costos totales.

LI: valor inferior obtenido de los valores de los costos totales.

En la tabla 8 se presentan los valores encontrados para el área del intercambiador HE1 (única variable de decisión del problema), para cada una de las 10 corridas.

Tabla 8. Valores de las variables de decisión de acuerdo al ajuste de parámetros

Combinación	Ajuste de Parámetros			Valores de la variable de decisión en m ²				
	Iter	e	crit_rep	A				
1	3	0.1	0.01	95.8163	99.2144	98.4041	99.8701	99.9967
				99.5080	99.8992	99.9416	99.9579	84.5219
2	5	0.1	0.01	97.3619	98.9378	99.9887	54.9773	42.1911
				99.9856	98.5185	89.5679	99.4117	99.8858
3	5	0.1	0.05	97.3619	98.9378	99.9395	99.8741	82.5331
				53.5212	99.9683	65.9650	100.0000	80.1067
4	5	0.5	0.05	96.9552	97.9368	100.0000	94.9030	100.000
				99.6350	91.6949	100.0000	100.000	99.9879
5	10	0.1	0.1	100.000	93.9368	100.0000	100.000	100.000
				97.1590	100.000	100.0000	100.000	99.9791

En base a los resultados obtenidos, se determina que el mejor juego de parámetros es: iter = 10, e = 0.1 y crit_rep = 0.1, ya que obtienen el mejor valor promedio del costo (ver tabla 7) y la mayor robustez (la desviación estándar es la menor, indicando que el desempeño del algoritmo es constante). Estos resultados se ilustran en la Figura 21, donde se grafica la evolución en el tiempo (generaciones) de la mejor solución encontrada, para cada una de las 10 ejecuciones realizadas con la combinación óptima de parámetros. Se puede apreciar que, independientemente de la calidad de la primera solución encontrada, todas las corridas convergen rápidamente hacia un costo mínimo. La Tabla 8 indica que este costo mínimo se caracteriza por un área grande del intercambiador HE1, que efectivamente adopta valores cercanos a su cota superior. Esta tendencia se explicará más adelante.

En cuanto a los tiempos CPU, son similares para cada juego de parámetros, equivalentes a 40 minutos por ejecución del algoritmo (en un equipo con procesador AMD A8-7410 APU y 6 GB de memoria RAM).

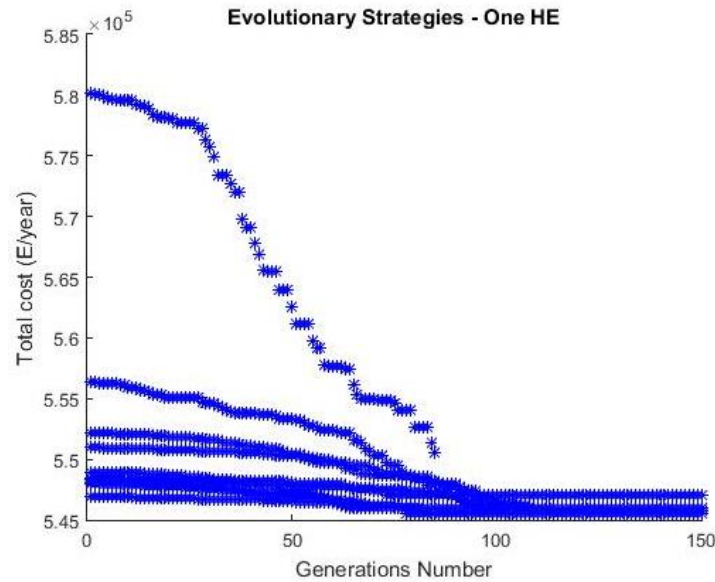


Figura 21. Mejor resultado de acuerdo al ajuste de parámetros

4.1.2 Evolución Diferencial

Para el algoritmo de Evolución Diferencial, los parámetros a ajustar son:

- (1) el parámetro cru, que denota la probabilidad de cruza;
- (2) el parámetro F, que denota la probabilidad de mutación y
- (3) la probabilidad de reparación (crit_rep, ver capítulo anterior), sobre el uso de las técnicas de reparación en caso de que una variable salga de su rango de variación (re-inicialización aleatoria o valor de la cota violada). Sin embargo, para este parámetro, se eligió el mismo valor que para las Estrategias Evolutivas, i.e. crit_rep = 0.1.

Se toman en cuenta los siguientes valores de los parámetros a ajustar:

- Tamaño de la población (número de ejecuciones): 5, 10
- Número de generaciones: 15, 30
- Probabilidad de cruza: 0.7, 0.9
- Parámetro F: 0.7, 0.9

Cabe mencionar que, para poder comparar de manera justa el algoritmo de Evolución Diferencial con el de Estrategias Evolutivas, ambos deben utilizar el mismo número de evaluaciones de la función objetivo, es decir 150 (ver subsección anterior). Por lo tanto, las combinaciones (5 individuos, 30 generaciones) y (10 individuos, 15 generaciones) son las únicas que fueron probadas, ya que garantizan 150 evaluaciones de solución. Como en el caso anterior, se realizaron 10 ejecuciones por combinación de parámetros. Los resultados de este estudio de sensibilidad se pueden observar en la Tabla 9.

Tabla 9. Ajuste de parámetros para algoritmo de ED

Ajuste de Parámetros				Resultados				
Generaciones	Tam. de	Cruza	F	\bar{X}	σ	LS (Mejor	LI (peor	Tiempo total de

	<i>Pob.</i>					<i>resultado)</i>	<i>resultado)</i>	<i>ejecución [s]</i>
30	5	0.7	0.7	546450	1503.4	545752.52	550660	9756.77
30	5	0.7	0.9	546020	629.70	545530.09	547760	10571.56
30	5	0.9	0.7	546450	1503.4	545752.52	550660	11356.77
30	5	0.9	0.9	546020	629.70	545530.09	547760	12086.65
15	10	0.7	0.7	545830	118.51	545640.08	545940	9387.14
15	10	0.7	0.9	545870	88.42	545685.50	545950	9884.65
15	10	0.9	0.7	545830	118.51	545640.08	545940	10667.55
15	10	0.9	0.9	545870	88.42	545685.50	545950	11940.06

Se aprecia en la Tabla 9 que el factor de cruza no tiene impacto sobre los resultados pero el parámetro F sí- Además, está claro que los mejores resultados se obtienen para 10 individuos y 15 generaciones, ya que el promedio de los costos obtenidos es menor, y la desviación estándar también, indicando una mejor robustez del algoritmo.

En la Tabla 10, se presentan los valores encontrados para el área del intercambiador HE1 (única variable de decisión del problema), para cada una de las 10 corridas presentadas en la tabla anterior.

Tabla 10. Resultados que toman las variables de decisión en un algoritmo de ED

Ajuste de Parámetros				Valores de la variable de decisión en m²				
Generaciones	Tamaño de Población	Cruza	F	A				
30	5	0.7	0.7	90.3633	64.5586	96.5909	98.8748	99.9918
				98.5366	99.9986	99.9472	99.7421	99.9960
30	5	0.7	0.9	99.9776	99.9922	99.2078	98.3600	79.9909
				99.9219	99.9802	99.4441	99.9580	99.9694
30	5	0.9	0.7	90.3633	64.5586	96.5909	98.8748	99.9918
				98.5366	99.9986	99.9472	99.7421	99.9960
30	5	0.9	0.9	99.9776	99.9922	99.2078	98.3600	79.9909
				99.9219	99.9802	99.4441	99.9580	99.9694
15	10	0.7	0.7	99.1879	99.3373	99.9710	99.9322	99.9042
				99.6348	99.8754	99.1159	99.9875	99.9462
15	10	0.7	0.9	99.9849	99.9225	99.9314	96.7457	95.7924
				99.6659	97.4390	97.7597	98.3681	99.9371
15	10	0.9	0.7	99.1879	99.3373	99.9710	99.9322	99.9042
				99.6348	99.8754	99.1159	99.9875	99.9462
15	10	0.9	0.9	99.9849	99.9225	99.9314	96.7457	95.7924
				99.6659	97.4390	97.7597	98.3681	99.9371

En base a los resultados obtenidos, se determina que el mejor juego de parámetros es la combinación cuyos parámetros son: Generaciones=10 tamaño de población: 15, Probabilidad de cruza: 0.7 ó 0.9, F: 0.7 y crit_rep: 0.01. Estos resultados se ilustran en la Figura 22, que grafica la evolución en el tiempo (generaciones) de la mejor solución encontrada, para cada una de las 10 ejecuciones realizadas con la combinación óptima de parámetros.

Asimismo, se puede apreciar que, independientemente de la calidad de la primera solución encontrada, todas las corridas convergen hacia un costo mínimo. La tabla 10 confirma que, al igual que para ES, el este costo mínimo determinado se caracteriza por un área grande del intercambiador HE1.

En cuanto a los tiempos CPU del algoritmo de Evolución Diferencial, no se pudieron medir debido a un cambio de equipo de cómputo. Sin embargo, dado que cada ejecución implica el mismo número de evaluaciones que para el algoritmo de ES y que los procesos de variación (selección, cruza y mutación) son poco costosos comparados con la evaluación mediante simulación, se puede inferir que los tiempos CPU serán similares a los de las Estrategias Evolutivas.

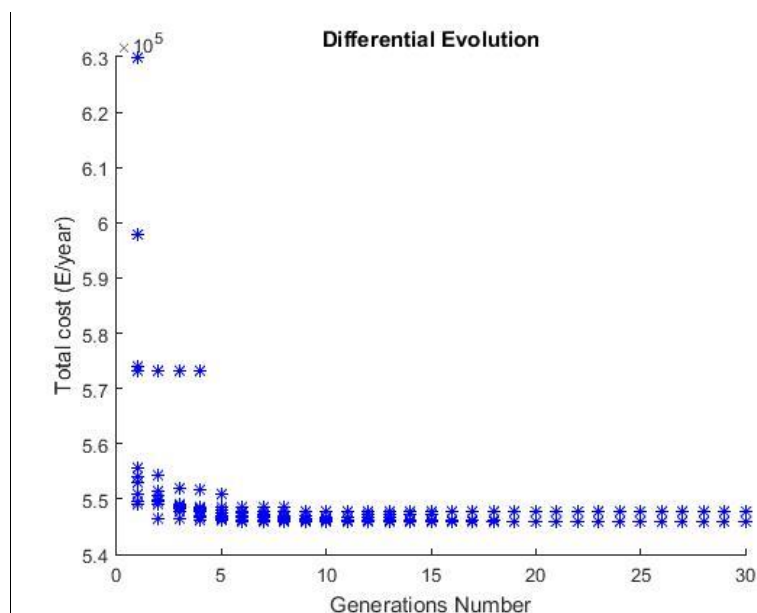


Figura 22. Mejor resultado de acuerdo al ajuste de parámetros para ED

4.2 Resultados con Estrategias Evolutivas para los diferentes escenarios

Una vez ajustados los parámetros de operación de los algoritmos, se pueden efectuar los experimentos computacionales definitivos, que consisten en realizar 10 ejecuciones con cada algoritmo. Cabe mencionar que, así como se explicó anteriormente, esos experimentos definitivos se realizan para diferentes valores del calor a proporcionar al proceso en el módulo PROCESS (Qprocess), de forma tal que se pueda evaluar la robustez de la estrategia propuesta frente a alguna variabilidad de las condiciones de operación.

a) Escenario 1 (Qprocess =2.5 Gcal/h)

Para el algoritmo de Estrategias Evolutivas estos son los resultados:

Tabla 11. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones

Mejor solución encontrada: Costo = 545,610 \$/año y Área = 99.9887 m ²
Peor solución (LI) = 559,800 Desviación estándar = 4,784.30 Promedio (Media) = 548,080

Es notorio que, para casi todas las corridas, las Estrategias Evolutivas validan la existencia del intercambiador HE1, asignando un valor al área de transferencia similar a la cota superior permitida (100 m²). Es decir, el algoritmo evolutivo confirma completamente la estrategia de recuperación de aguas de purga, mediante la integración del intercambiador HE1 al proceso existente. Además, esta metodología permite un ahorro económico tan importante que siempre propone el mayor diseño posible. La explicación de este comportamiento es el orden de magnitud relativo de los costos de operación del proceso y el costo de inversión (anualizado) del intercambiador nuevo HE1. Efectivamente, en la mejor solución encontrada (ver Tabla 11):

- El costo de operación anual relacionado con los elementos de la caldera y el precalentador es igual a 528080.769 \$/año.
- en cambio, el costo de inversión para el intercambiador nuevo, HE1, anualizado con respecto a un horizonte de 10 años, vale 16580.42 \$/año.

Está claro, por lo tanto, que el costo de inversión de HE1 es mucho menor al costo de operación total, lo que lleva a la decisión de siempre integrarlo al diseño final, con el mayor tamaño posible (ya que el incremento en costo es despreciable frente a las ganancias ocasionadas sobre el costo de operación).

Además, para la mejor solución encontrada, Aspen Plus reporta la información mostrada en la Tabla 12:

Tabla 12. Resultados obtenidos en Aspen Plus para la mejor solución

Qboiler [Gcal/hr] =	2.97
Qprocess [Gcal/hr] =	-2.5
Qpheater [Gcal/hr] =	-0.437
QHE1 [Gcal/hr] =	0.6839
Temperatura retorno de condensados =	163.462
Temperatura purga de caldera=	32.484

Estos datos demuestran que se cumplen las especificaciones requeridas en el diseño del modelo de simulación: el proceso recupera efectivamente un calor de 2.5 Gcal/hr. Para ello, el Boiler tiene que proporcionar un calor de 2.97 Gcal/hr al agua. Para respetar las temperaturas requeridas, el precalentador PHEATER, en realidad, recupera calor (el valor correspondiente es negativo), demostrando que en esta configuración, el intercambiador nuevo, HE1, no sólo evita pre-calentar el agua, sino que permite recuperar alguna cantidad de calor (esta ganancia se ve reflejada por un costo “negativo” en la función objetivo). La Figura 22, además,

demuestra que se cumplen las especificaciones de diseño sobre la fase de líquido saturado para el agua en la corriente de condensados.

Results <input checked="" type="checkbox"/> Status				
	Variable	Initial value	Final value	Units
▶	MANIPULATED	2.80091	2.95079	GCAL/HR
▶	TCOND	127.658	160	C

Figura 23. Resultados de las especificaciones de diseño

A continuación, se analiza en detalle la configuración determinada por el proceso propuesto de optimización-simulación:

- **En HE1**

Además de obtener líquido saturado en la corriente de salida de la caldera (corriente satwater), la temperatura es de 32.49°C, lo cual cumple con las regulaciones mexicanas y esta agua se podría desechar directamente al drenaje, sin necesidad de ser enfriada. Se aprovecha al máximo su energía para calentar la corriente Hotsoft, corriente de entrada al pre-calentador de caldera, demostrando que aprovechar todo el calor sensible de la corriente de purga proveniente de la caldera permite evitar el uso de un pre-calentador de agua para alimentación a caldera, Figura 23.

Summary <input type="checkbox"/> Balance <input type="checkbox"/> Exchanger Details <input type="checkbox"/> Pres Drop/Velocities <input type="checkbox"/> Zones <input type="checkbox"/> Utility Usage <input checked="" type="checkbox"/> Status									
Heatx results									
Calculation Model <input type="text" value="Shortcut"/>									
Inlet					Outlet				
Hot stream: SATWATER					BD2				
Temperature		170.481	C		32.4933		C		
Pressure		8	bar		8		bar		
Vapor fraction		0			0				
1st liquid / Total liquid		1			1				
Cold stream: COLDSOFT					HOTSOFT				
Temperature		25.0556	C		120.257		C		
Pressure		2	bar		2		bar		
Vapor fraction		0			0.0833574				
1st liquid / Total liquid		1			1				
Heat duty		0.683858	Gcal/hr						

Figura 24. Resultados para el intercambiador de calor HE1

- **En FBOILER:**

Se muestran en la Tabla 13 los resultados de salida del tanque flash.

Tabla 13. Parámetros resultantes de la simulación correspondientes al Tanque Flash

Temperatura de Salida [°C]	170.481
Presión de Salida [bar]	8
Fracción de Vaporización	0.503

Los resultados de la Tabla 14 muestran que el vapor formado por el flasheo está libre de sales como las que provocan dureza e incrustación, con ausencia de Na_2CO_3 , Na^+ , CO_2 , $\text{CaCl}_2(\text{S})$, $\text{NaCl}(\text{S})$, HCO_3^- , Cl_2 . Sin embargo, se observa que en la purga, sí existe precipitación de las sales.

Tabla 14. Características de las corrientes de vapor a proceso y agua purgada

	SATWATER	STEAMP
Fase	Mezcla	Vapor
Temperatura [C]	170.481	170.481
Presión [bar]	8	8
Fracción de Vapor Molar	0	1
Fracción líquida molar	0.999	0
Fracción sólida molar	8.96E-07	0
Fracción de Vapor de Masa	0	1
Fracción líquida de Masa	0.999	0
Fracción sólida de Masa	4.98E-06	0

En las Figuras 25 y 26 podemos observar la concentración (tanto molar como másica) y los componentes presentes en la corriente SATWATER (corriente de purga), en donde observamos que la cantidad de estas sales que precipita es del rango de 1×10^{-4} kmol/L.

	Units	SATWATER
— Mole Flows	kmol/hr	271.993
H2O	kmol/hr	271.991
CA++	kmol/hr	0.000661979
MG++	kmol/hr	0
CO3--	kmol/hr	0.000661979
HCO3-	kmol/hr	0
NaCl	kmol/hr	0
H3O+	kmol/hr	0
NA+	kmol/hr	0
HCL	kmol/hr	0
CO2	kmol/hr	0
NaCl(S)	kmol/hr	0
MGCL2(S)	kmol/hr	0
CALCI(S)	kmol/hr	0
SODIU(S)	kmol/hr	0
SALT5	kmol/hr	0
MGCO3(S)	kmol/hr	0
CACO3(S)	kmol/hr	0.000243784

Figura 25. Componentes en moles de la corriente SATWATER

	Units	SATWATER
Mass Flows	kg/hr	4900.11
H2O	kg/hr	4899.99
CA++	kg/hr	0.0265301
MG++	kg/hr	0
CO3--	kg/hr	0.0397256
HCO3-	kg/hr	0
NaCl	kg/hr	0
H3O+	kg/hr	0
NA+	kg/hr	0
HCL	kg/hr	0
CO2	kg/hr	0
NaCl(S)	kg/hr	0
MgCl2(S)	kg/hr	0
CaCl2(S)	kg/hr	0
SODIU(S)	kg/hr	0
SALT5	kg/hr	0
MgCO3(S)	kg/hr	0
CaCO3(S)	kg/hr	0.0243996
CL-	kg/hr	0
SiO2	kg/hr	0.02

Figura 26. Componentes de la corriente SATWATER

Las composiciones de los compuestos utilizados dependerán de la calidad del agua de red de cada empresa, de acuerdo a su localización geográfica y a los métodos de purificación de agua empleados.

• En PHEATER

Como fue comentado, se puede observar que la energía que requiere este precalentador es negativa (Figura 24), indicando que si se decidiera utilizar la energía térmica contenida en el agua de la caldera, representarían 0.437 Gcal/hr. En contraste, sin la colocación del intercambiador de calor HE1, es decir, de no recuperarse el agua de la purga de caldera, se necesitan suministrar 1.083 Gcal/hr en el PHEATER para alcanzar las condiciones de presión y temperatura deseadas. Por lo cual, una vez más se demuestra que, aprovechando el calor proveniente del agua de purga de la caldera, se puede ahorrar el uso de un precalentador de agua.

Summary	Balance	Phase Equilibrium	Utility Usage	Status
Outlet temperature	120.212	C		
Outlet pressure	2	bar		
Vapor fraction	0			
Heat duty	-0.436562	Gcal/hr		
Net duty	0	Gcal/hr		
1st liquid / Total liquid	1			
Pressure-drop correlation parameter				

Figura 27. Resultados para el bloque PHEATER

b) Escenario 2 ($Q_{process} = 4.5 \text{ Gcal/h}$)

Primeramente, se calcula (mediante simulación) el calor que tiene que proporcionar la caldera para satisfacer la demanda del proceso (en este caso, 4.5 Gcal/hr) a través del módulo “Especificaciones de diseño (Design Specs)”. Los resultados están disponibles en la Figura 25.

	Variable	Initial value	Final value	Units
▶	MANIPULATED	6	6	GCAL/HR
▶	QPROCESO	-4.5	-4.5	GCAL/HR

Figura 28. Resultados de las especificaciones de diseño para el escenario 2 de demanda de calor

Con ese valor del Q_{boiler} (6 Gcal/hr), se puede calcular el flujo de agua necesario a través de otro modulo “Especificaciones de diseño”, Figura 26.

Results	<input checked="" type="checkbox"/> Status			
	Variable	Initial value	Final value	Units
▶	MANIPULATED	7120.63	7120.63	KG/HR
▶	VARWATER	-4.5	-4.5	GCAL/HR

Figura 29. Resultados de las especificaciones de diseño para la alimentación a proceso, escenario 2

Una vez obtenidos los valores anteriores, se ejecuta el algoritmo de ES de acuerdo al ajuste de parámetros realizado en la sección 4.1.1 y el flujo de alimentación indicado en la Figura 26. Los resultados correspondientes se presentan en la Tabla 15 y se grafican en la Figura 27.

Tabla 15. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones

Mejor solución encontrada: Costo = 1,001,900 \$/año y Área = 99.9887 m ²
Peor solución (LI) = 1,066,400 Desviación estándar = 4117.0 Promedio (Media) = 1,024,900 Tiempo de computo: 10926.41 segundos

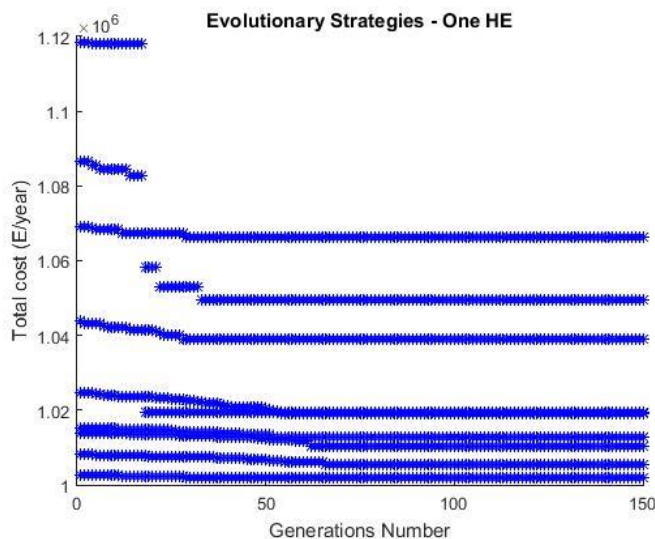


Figura 30. Resultados del segundo caso con el algoritmo de ES

Una primera observación es sobre el valor del costo de la mejor solución encontrada: 1,001,900 \$/año, es decir cerca del doble de los 545,610 \$/año encontrados cuando $Q_{process} = 2.5$ Gcal/h. Además, se puede notar en la Figura 27 que, al contrario del experimento anterior ($Q_{process} = 2.5$ Gcal/h), las 10 corridas no convergen todas al valor mínimo obtenido. Esta tendencia se ve reflejada en la desviación estándar de las soluciones, mucho mayor en este caso (\$21,970 contra \$4,784 para $Q_{process} = 2.5$ Gcal/h). Sin embargo, una característica común con el experimento anterior es que la mejor solución encontrada se caracteriza por un área de intercambio similar, cercana a la cota máxima impuesta (100 m^2). Así, parece que, aunque la solución óptima del problema en ambas configuraciones es similar, la segunda demanda en calor del proceso hace el problema de optimización más difícil (la convergencia no se obtiene para todas las corridas). Asimismo, lleva a soluciones que son, lógicamente, mucho más costosas.

Además, para la mejor solución encontrada, Aspen Plus reporta la información mostrada en la tabla 16:

Tabla 16. Resultados obtenidos en Aspen Plus para la mejor solución

Qboiler [Gcal/hr] =	6.0
Qprocess [Gcal/hr] =	-4.5
Qpheater [Gcal/hr] =	-0.5310
QHE1 [Gcal/hr] =	0.9355
Temperatura retorno de condensados =	170.481
Temperatura purga de caldera=	35.696

El proceso recupera efectivamente un calor de 4.5 Gcal/hr. Para ello, el bloque Boiler tiene que proporcionar un calor de 6 Gcal/hr. De la misma manera que en el caso anterior, para respetar las temperaturas requeridas, el precalentador PHEATER, recupera calor (el valor correspondiente es negativo).

c) Escenario 3 ($Q_{process} = 6.5 \text{ Gcal/h}$)

Gracias a un procedimiento similar a los dos casos previamente tratados, se calcula primero el calor que tiene que proporcionar la caldera para satisfacer la demanda del proceso (en este caso 6.5 Gcal/hr) a través del módulo “Especificaciones de diseño (Design Specs)” (ver Figura 28).

Results <input checked="" type="checkbox"/> Status				
	Variable	Initial value	Final value	Units
▶	MANIPULATED	7.9	7.9	Gcal/HR
▶	QPROCESO	-6.5	-6.5	Gcal/HR

Figura 31. Resultados de especificaciones de diseño para escenario 3 de demanda de calor

Con el valor correspondiente de Q_{boiler} (7.9 Gcal/hr), se calcula el flujo de agua de alimentación necesario a través de otro modulo “Especificaciones de diseño”, Figura 29.

Results <input checked="" type="checkbox"/> Status				
	Variable	Initial value	Final value	Units
▶	MANIPULATED	10120.6	10120.6	KG/HR
▶	VARWATER	-6.5	-6.5	Gcal/HR

Figura 32. Resultados de las especificaciones de diseño para la alimentación a proceso, escenario 3

Una vez obtenidos los valores anteriores, se ejecuta el algoritmo de ES de acuerdo al ajuste de parámetros realizado en la sección 4.1.1 y el flujo de alimentación indicado en la Figura 29. Los resultados correspondientes se presentan en la Tabla 17 y se grafican en la Figura 30.

Tabla 17. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones

Mejor solución encontrada: Costo = 1,389,900 \$/año y Área = 98.9886 m ²
Peor solución (LI) = 1,404,500 Desviación estándar = 4514.6 Promedio (Media) = 1,392,500 Tiempo de computo: 11591.702 segundos

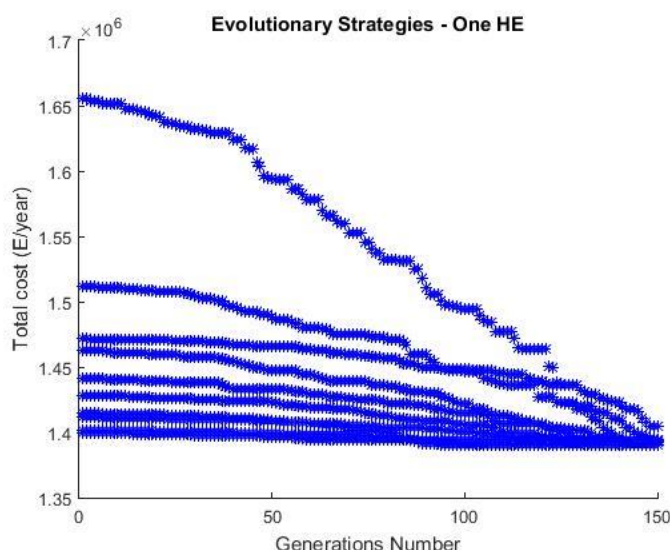


Figura 33. Resultados del tercer caso para el algoritmo de ES

Al igual que para el segundo escenario, el valor del costo de la mejor solución encontrada muestra un incremento con respecto a valores menores del calor requerido por el proceso: 1,389,900 \$/año, es decir más de los 1,001,900\$/año encontrados cuando $Q_{process} = 4.5$ Gcal/h. Además, se puede notar en la Figura 30 que, como en el primer experimento ($Q_{process} = 2.5$ Gcal/h), las 10 corridas convergen en su mayoría al valor mínimo obtenido (con una desviación estándar relativamente baja).

Cabe mencionarse que, en los tres experimentos realizados, la mejor solución encontrada se caracteriza por un área de intercambio similar, cercana a la cota máxima impuesta (100 m^2). Esta cota limita la recuperación de calor efectuada por el intercambiador HE1, así que cuando crece $Q_{process}$, la caldera tiene que producir la diferencia lo que, como era de esperarse, produce soluciones mucho más costosas. Aun así, estos experimentos demuestran que la estrategia propuesta de recuperación de calor de agua de purgas es robusta: se adapta a diferentes demandas en calor del proceso y la eficiencia de la recuperación sólo parece ser acotada por el tamaño límite de la superficie del intercambiador nuevo.

En cuanto a la mejor solución encontrada, Aspen Plus reporta la información mostrada en la tabla 18:

Tabla 18. Resultados obtenidos en Aspen Plus para la mejor solución

Q_{boiler} [Gcal/hr] =	7.9
$Q_{process}$ [Gcal/hr] =	-6.5
$Q_{pheater}$ [Gcal/hr] =	-1.252
Q_{HE1} [Gcal/hr] =	1.288
Temperatura retorno de condensados =	170.481
Temperatura purga de caldera=	40.657

El proceso recupera efectivamente un calor de 6.5 Gcal/hr. Para ello, el Boiler tiene que proporcionar un calor de 7.9 Gcal/hr. De la misma manera que en los casos anteriores, para respetar las temperaturas requeridas, el precalentador PHEATER, en realidad, recupera calor (el valor correspondiente es negativo).

4.3 Resultados con Evolución Diferencial para los diferentes escenarios

a) Escenario 1 ($Q_{process} = 2.5$ Gcal/h)

Para el algoritmo de Evolución Diferencial, estos son los resultados:

Tabla 19. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones

Mejor solución encontrada: Costo = 545530.09 \$/año y Área = 99.9922 m ²
Peor solución (LI) = 547760 Desviación estándar = 629.70 Promedio (Media) = 546020

Es notorio que, el algoritmo de Evolución Diferencial valida la existencia del intercambiador HE1, asignando un valor al área de transferencia con tendencia a la cota superior permitida (100 m²) lo que permite un ahorro económico tan importante que siempre propone el mayor diseño posible. Es decir, este algoritmo confirma completamente la estrategia de recuperación de aguas de purga, mediante la integración del intercambiador HE1 al proceso existente.

Además, la mejor solución encontrada en Aspen Plus se muestra en la Tabla 20:

Tabla 20. Resultados obtenidos en Aspen Plus para la mejor solución

Qboiler [Gcal/hr] =	2.97
Qprocess [Gcal/hr] =	-2.5
Qpheater [Gcal/hr] =	-0.436
QHE1 [Gcal/hr] =	0.6839
Temperatura retorno de condensados =	163.462
Temperatura purga de caldera=	32.484

Estos datos demuestran que se cumplen las especificaciones requeridas en el diseño del modelo de simulación: el proceso recupera efectivamente un calor de 2.5 Gcal/hr. Para ello, el Boiler tiene que proporcionar un calor de 2.97 Gcal/hr al agua. Para respetar las temperaturas requeridas, el precalentador PHEATER, en realidad, recupera calor (el valor correspondiente es negativo), demostrando que en esta configuración, el intercambiador nuevo, HE1, no sólo evita pre-calentar el agua, sino que permite recuperar calor.

b) Escenario 2 ($Q_{process} = 4.5$ Gcal/h)

Se ejecuta el algoritmo de ES de acuerdo al ajuste de parámetros realizado en la sección 4.1. Los resultados correspondientes se presentan en la Tabla 21.

Tabla 21. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones

Mejor solución encontrada: Costo = 1,000,200 \$/año y Área = 99.9956 m ²
Peor solución (LI) = 1,042,156 Desviación estándar = 1249.68 Promedio (Media) = 1,001,567

c) Escenario 3 (Qprocess =6.5 Gcal/h)

Se ejecuta el algoritmo de ES de acuerdo al ajuste de parámetros realizado en la sección 4.1. Los resultados correspondientes se presentan en la Tabla 22.

Tabla 22. Resultados para 10 corridas y 150 iteraciones

Mejor solución encontrada: Costo = 1,271,400 \$/año y Área = 99.9955 m ²
Peor solución (LI) = 1,363,120 Desviación estándar = 1567.89 Promedio (Media) = 1,300,671

4.4 Resultados comparativos entre Estrategias evolutivas y Evolución Diferencial para los diferentes escenarios

Para finalizar se presenta en la tabla 23 los resultados comparativos para la mejor solución encontrada para cada escenario aplicado en este trabajo.

De manera idéntica a las Estrategias Evolutivas, se realizan los experimentos definitivos con Evolución Diferencial, consistiendo en ejecutar 10 veces el algoritmo para cada uno de los tres escenarios de demanda de calor considerados. La tabla 23 enseña los resultados obtenidos y recuerda también las mejores soluciones identificadas por ES, para poder compararlas con las de ED.

Tabla 23. Tabla comparativa con las mejores soluciones encontradas por ambos Algoritmos Evolutivos

Escenario 1		
Valores	Estrategias Evolutivas	Evolución Diferencial
Costo (\$/año)	545,610	545,530
Área (m²)	99.9887	99.9922
Escenario 2		
Valores	Estrategias Evolutivas	Evolución Diferencial
Costo (\$/año)	1,001,900	1,000,200
Área (m²)	99.9887	99.9956
Escenario 3		
Valores	Estrategias Evolutivas	Evolución Diferencial
Costo (\$/año)	1,389,900	1,271,400
Área (m²)	98.9886	99.9955

Los resultados obtenidos ilustran, en primer lugar, la congruencia de las soluciones determinadas por ambos algoritmos. Efectivamente, ED también fija el área del intercambiador HE1 a un valor cercano a su cota superior. De hecho, ED determina soluciones siempre un poco mejores que ES, esta diferencia se ve incrementada en el último caso de estudio. Por lo tanto, todos los comentarios emitidos sobre las soluciones de ES aplican igualmente para las de ED. Como fue comentado anteriormente, se observa que cuanto más calor demande el proceso, más costoso será satisfacerlo, pero a su vez se puede recuperar más energía. Cabe mencionar que, utilizando una cota superior más alta para el área del intercambiador, se podría seguramente recuperar una cantidad mayor de calor y, así, disminuir consecuentemente los costos totales de las configuraciones finales.

En cuanto a robustez de los algoritmos, los estadísticos presentados en la tabla 23 y 24 correspondiente a las 10 ejecuciones de cada algoritmo permiten deducir que los resultados favorecen al algoritmo de evolución diferencial, lo cual lo corrobora la desviación estándar, los valores de costos del intercambiador de calor HE1 y los tiempos de ejecución de cada algoritmo.

Tabla 24. Resultados comparativos entre algoritmos ED y ES, costos y desviación estándar

Escenario 1		
Valores	Estrategias Evolutivas	Evolución Diferencial
Costo total promedio (\$/año)	545,610	545,530
Desviación estándar	4784.30	629.70
Escenario 2		
Valores	Estrategias Evolutivas	Evolución Diferencial
Costo total promedio (\$/año)	1,001,900	1,000,200
Desviación estándar	4117.0	1249.68
Escenario 3		
Valores	Estrategias Evolutivas	Evolución Diferencial
Costo total promedio (\$/año)	1,389,900	1,271,400
Desviación estándar	4514.6	1567.89

CAPÍTULO 5

Conclusiones

En el presente trabajo, se propone una metodología global para la reutilización de la energía térmica del agua de purgas de procesos térmicos industriales. La estrategia combina diferentes herramientas, i.e. la simulación del proceso y su optimización simultánea mediante algoritmos evolutivos. Los experimentos computacionales demuestran la eficacia de la metodología propuesta, que produce ahorros económicos significativos.

Tomando el caso concreto de una fábrica de alimentos, se desarrolló en primer lugar un modelo de simulación del proceso considerado. Este diseño integra un intercambiador de calor nuevo (HE1), destinado a recuperar la energía térmica de la purga de la caldera. Por otro lado, esta fase incluye el uso de modelos termodinámicos especializados (Elec NRTL) para el cálculo de los productos de solubilidad y constantes de equilibrio en sistemas de electrolitos. Además, se tiene que integrar módulos de especificación de diseño, actuando como restricciones que garantizan que el agua a la salida de la caldera (tanto en la corriente de purgado como en la corriente de retorno de condensados) se encuentre en estado de líquido saturado.

De acuerdo a este diseño, se formula un problema de optimización cuya única variable de decisión es el área de transferencia de este nuevo intercambiador (HE1). El objetivo consiste en minimizar el costo total de proceso, que incluye particularmente el costo de inversión del intercambiador HE1 y los costos de operación de los diferentes elementos del proceso. El cálculo de la función objetivo correspondiente se efectúa mediante simulación con Aspen Plus, mientras que se desarrollan dos algoritmos evolutivos, Estrategias Evolutivas y Evolución Diferencial, como optimizadores. Implementados en Matlab, estas metaheurísticas pueden interactuar con Aspen Plus para solicitar la evaluación de una solución gracias a VBA-Excel, usado como interfaz.

Después de una primera fase de calibración de los algoritmos de resolución, los experimentos computacionales fueron realizados considerando tres posibles escenarios, asociados a tres valores diferentes de la cantidad de calor a proporcionar al proceso. En cualquier caso, los algoritmos evolutivos utilizados convergieron consistentemente a la misma solución, correspondiente a la mayor área permitida para el intercambiador HE1. En esta configuración, el impacto del intercambiador es anular por completo la cantidad de calor a proporcionar en el equipo de precalentamiento y, además, reducir el calor a producir en la caldera.

Así, de acuerdo a los resultados obtenidos, se demostró que, mediante la combinación de dos herramientas, simulación y optimización, se puede reproducir un comportamiento cercano al funcionamiento operativo del proceso industrial real. Además, mediante la colocación de un intercambiador de calor y con la

recuperación total del retorno de condensados, se puede disminuir significativamente los costos energéticos del proceso, principalmente gracias a los ahorros realizados en el tanque precalentador de agua de caldera. De esta manera, este estudio confirma satisfactoriamente los beneficios, tanto energéticos como económicos, de la reutilización del agua de purgas de equipos térmicos.

Además, la variación de la demanda de calor del proceso, de acuerdo a diferentes escenarios establecidos, permitió evaluar la robustez de la metodología propuesta, es decir la efectividad de ésta frente a diferentes configuraciones, sin notar cambios considerables en el área óptima.

Así, el diseño del intercambiador de calor propuesto satisface los requerimientos de calor planteados, así como aprovecha exitosamente la energía térmica de la purga de caldera. Cabe mencionar la aplicación exitosa de los algoritmos evolutivos de Estrategias Evolutivas y Evolución Diferencial, que coinciden en las soluciones encontradas para el diseño óptimo de un intercambiador de calor de carcasa y tubos. Asimismo, estos algoritmos pueden ser fácilmente modificados para adaptarse a la optimización de diferentes sistemas térmicos.

Finalmente, una de las perspectivas para trabajos futuros es el uso de herramientas de optimización multiobjetivo para tomar en cuenta, además del costo, el impacto ambiental del proceso global. Por otro lado, para la resolución del problema de recuperación de agua considerando fluctuaciones en la concentración en sales, se puede tomar en cuenta los parámetros asociados como inciertos y trabajar con un modelo de optimización estocástica.

Anexos

Anexo 1

Glosario

Agua dura: Agua que no contiene ningún tratamiento previo cuya dureza excede 300 ppm como CaCO_3 .

Bomba: Máquina hidráulica que transfiere energía al agua incrementándole su velocidad, la cual se reduce al transformarse en energía de presión [42].

Carga térmica: Cantidad de calor que absorbe una determinada masa de agua en el equipo térmico para incrementar su temperatura en un cierto intervalo de tiempo [43].

Ciclos de Concentración: La cantidad de un material disuelto en un líquido se mide en partes por millón.

Condensación: La condensación es el proceso donde el vapor es convertido en líquido ocurre cuando un vapor entra en contacto con una superficie que está a una temperatura por debajo de la temperatura de saturación del vapor. La condensación generalmente ocurre en las paredes de recipientes y superficies que contienen vapor, como tolvas, silos y tuberías. [10]

Electrolitos: Son iones en solución, pueden ser ácidos, bases o sales, entre los más comunes se encuentran el calcio, magnesio, potasio y sodio.

Flujo volumétrico; caudal; gasto: El flujo volumétrico, caudal o gasto es el volumen de agua que fluye por unidad de tiempo para cierta condición de carga [42].

Intercambiador de calor: Dispositivo para transferir calor entre dos medios, que estén separados por una barrera o que se encuentren en contacto [43]

Intercambio iónico: Proceso de remoción de aniones o cationes específicos disueltos en el agua, a través de su reemplazo por aniones o cationes provenientes de un medio de intercambio, natural o sintético, con el que se pone en contacto [45].

Precalentador: Equipo que calienta el agua de alimentación a sistemas en donde se requieren grandes temperaturas. El precalentamiento en etapas incrementa la eficiencia de la planta y minimiza el choque térmico. En el caso de sistemas de generación de vapor, una porción del vapor generado es sustraído y utilizado como fuente de calor para recalentar el agua de alimentación en etapas. Al entrar

el vapor al intercambiador de calor y fluir alrededor de los tubos, éste transfiere su energía térmica y se condensa [46].

Resinas de intercambio iónico: Son perlas de plástico minúsculas, con un diámetro de aproximadamente 0,6 mm. Estas bolitas son porosas y contienen agua, que es invisible y no se puede quitar. Esta proporción de agua se expresa como "retención de humedad". La estructura de la resina es un polímero (como todos los plásticos) en el cual un **ion fijo** ha sido inmovilizado de manera permanente. Este ion no se puede quitar o reemplazar: pertenece a la estructura de la resina. Para mantener la neutralidad eléctrica de la resina, cada uno de estos iones fijos está neutralizado por un **contra-ion** de carga opuesta. Este es móvil y puede entrar o salir de la resina.

Sólidos totales disueltos (STD): Cantidad total de sólidos expresada en mg/L o ppm, que permanecen en una muestra de agua cuando ésta se evapora totalmente [44].

Sólidos suspendidos totales (SST): Concentración de partículas que son retenidas en un medio filtrante de microfibras de vidrio, con un diámetro de poro de 1.5 micrómetros o su equivalente [44].

Solubilidad: La solubilidad de una sustancia es la cantidad presente en solución en presencia de material no disuelto. Las concentraciones de solubilidad se pueden expresar como peso, número de moles o volumen de hidrato o anhídrido disuelto en un peso especificado, número de moles o volumen de disolución o disolvente. El producto de solubilidad aumenta con la temperatura y así también lo hace la solubilidad. Es importante mencionar que la presencia de impurezas puede tener profundos efectos sobre la solubilidad de un compuesto [10].

Suavización o Ablandamiento: Proceso de remoción de los iones calcio y magnesio, principales causantes de la dureza del agua [45].

Anexo 2

Resultados del ajuste de parámetros para 10 corridas y 150 generaciones correspondiente a la sección 4.1.

- Para Estrategias Evolutivas

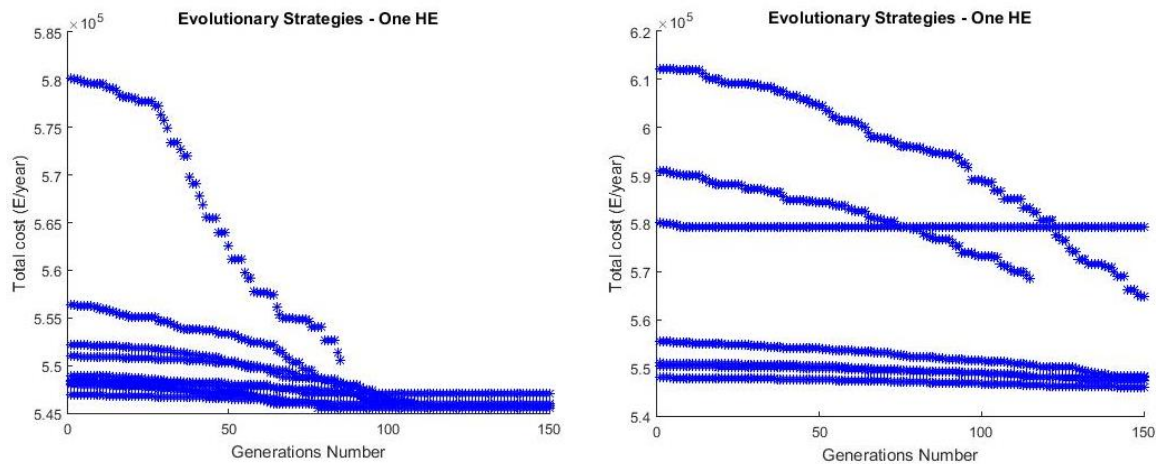


Figura 34. A la izquierda resultados del caso 1 y a la derecha gráfico del caso 2 sección 4.1

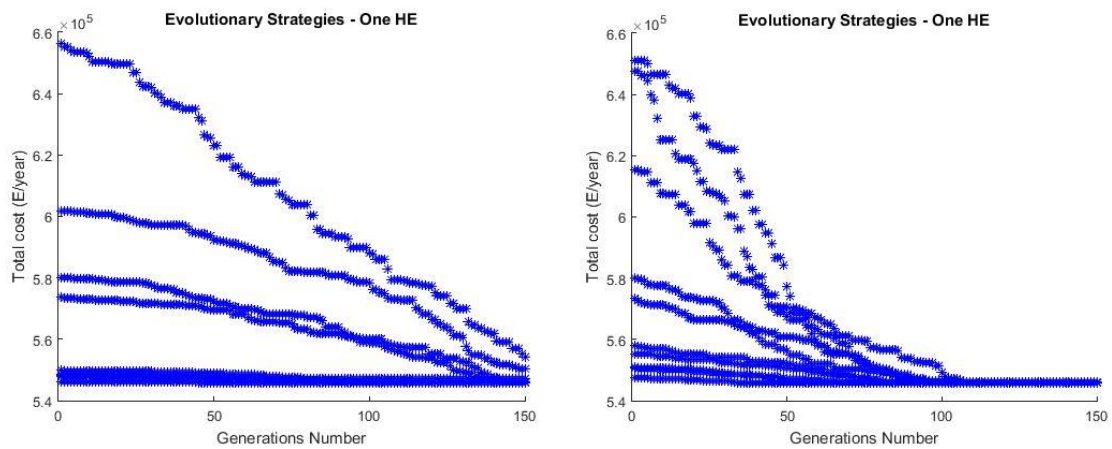


Figura 35. A la izquierda resultados del caso 3 y a la derecha gráfico del caso 4 sección 4.1

- Para Evolución Diferencial

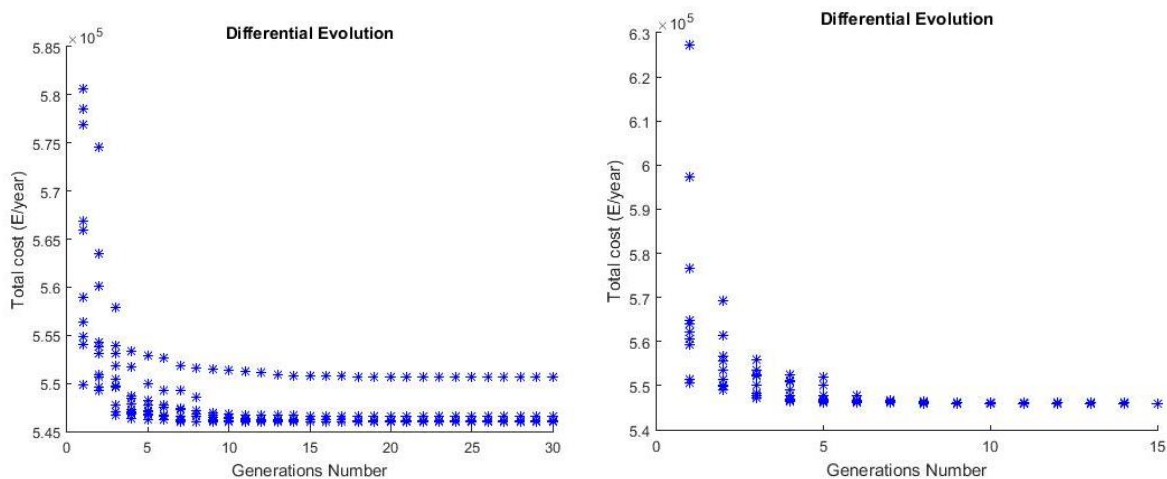


Figura 36. Resultados para 30 generaciones, tamaño de población de 5 a la izquierda parámetro de cruce y factor F de 0.7, a la derecha parámetro de cruce y factor F de 0.9

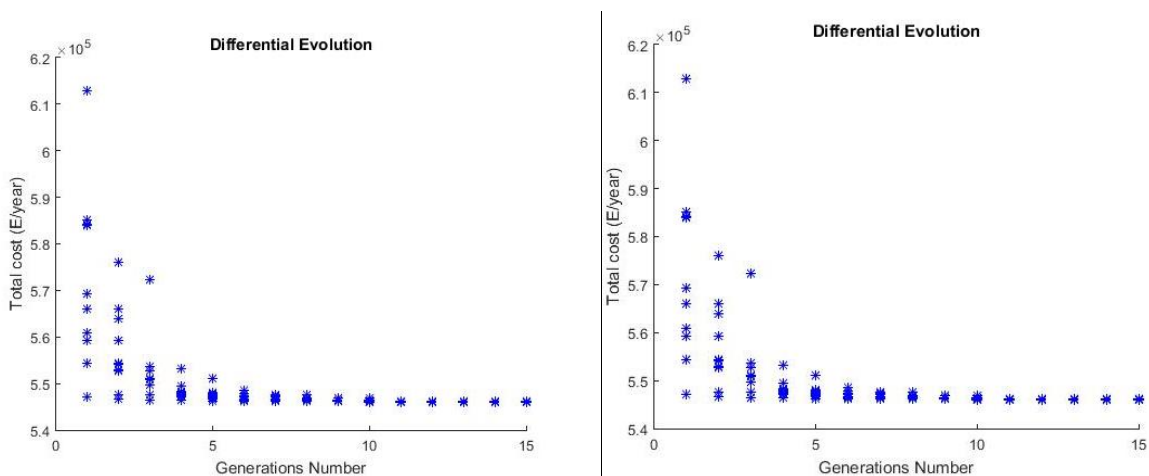


Figura 37. Resultados para 15 generaciones, tamaño de población de 10 a la izquierda parámetro de cruce y factor F de 0.7, a la derecha parámetro de cruce y factor F de 0.9

Anexo 3

Los cálculos de solubilidad para las sales utilizadas se realizaron a mano corroborando esta información con la reportada en literatura.

A temperatura de 20 a 25 °C.





Producto Literatura		
Solubi CaCl ₂	745	kg/m ³
PM CaCl ₂	128.9	kg/kmol
Concentración	5.779674	kmol/m ³
kps	193.0678971	kmol ³ /m ⁹

CaCl ₂ (S) <--> Ca ⁺⁺ + 2 Cl ⁻		
Producto Literatura		
Solubi CaCl ₂	745	kg/m ³
PM CaCl ₂	110.9	kg/kmol
Concentración	6.717764	kmol/m ³
kps	303.1615925	kmol ³ /m ⁹

CaCO ₃ (S) <--> CO ₃ ⁻⁻ + Ca ⁺⁺		
Producto Literatura		
Solubi CaCO ₃	0.013	kg/m ³
PM CaCO ₃	100.1	kg/kmol
Concentración	0.00012987	kmol/m ³
kps	1.68663E-08	kmol ² /m ⁶

MgCl ₂ <--> H ₂ O + Mg ⁺⁺ + 2 Cl ⁻		
Producto Literatura		
Solubi MgCl ₂	543	kg/m ³
PM MgCl ₂	113.211	kg/kmol
Concentración	4.796353711	kmol/m ³
kps	110.3401599	kmol ³ /m ⁹

MgCl ₂ (S) <--> Mg ⁺⁺ + 2 Cl ⁻		
Producto Literatura		
Solubi MgCl ₂	543	kg/m ³
PM MgCl ₂	95.211	kg/kmol
Concentración	5.703122538	kmol/m ³
kps	185.4975206	kmol ³ /m ⁹

MgCO ₃ (S) <--> CO ₃ ⁻⁻ + Mg ⁺⁺		
Producto Literatura		
Solubi MgCO ₃	0.139	kg/m ³
PM MgCO ₃	84.314	kg/kmol
Concentración	0.001648599	kmol/m ³
kps	2.71788E-06	kmol ² /m ⁶

NaHCO ₃ <--> HCO ₃ ⁻ + Na ⁺		
Producto Literatura		
Solubi NaHCO ₃	960	kg/m ³
PM NaHCO ₃	84.01	kg/kmol
Concentración	11.42721105	kmol/m ³
kps	130.5811523	kmol ² /m ⁶

SALT4 <--> H2O + CO3-- + 2 NA+		
Producto Literatura		
Solubi Na2CO3.H2O	503.1	kg/m3
PM NaHCO3.H2O	123.99	kg/kmol
Concentración	4.057585289	kmol/m3
kps	66.80407762	kmol3/m9

SODIU(S) <--> CO3-- + 2 NA+		
Producto Literatura		
Solubi Na2CO3	307	kg/m3
PM Na2CO3	105.99	kg/kmol
Concentración	2.89649967	kmol/m3
kps	24.30079322	kmol3/m9

NACL(S) <--> CL- + NA+		
Producto Literatura		
Solubi NaCl	359	kg/m3
PM NaCl	58.4	kg/kmol
Concentración	6.147260274	kmol/m3
kps	37.78880888	kmol2/m6

Anexo 4

Como se mencionó en la sección 3 se debe de calcular el calor que debe de producirse en la caldera (BOILER) para satisfacer la demanda del proceso; Calor de proceso: 2.5 Gcal/h a este calor de proceso le corresponde una alimentación de 4680 kg/h de Agua.

Para determinar el calor que debe de producirse en el bloque BOILER se utilizó la opción de especificaciones de diseño encontrando que se requiere proporcionar un calor de 2.97 Gcal/h de acuerdo al calor que requiere el proceso, este valor cambiara de acuerdo a la variación del área del intercambiador HE1.

A su vez se debe de establecer que el agua de purga de calderas (corriente SATWATER) debe de salir previa a su saturación actualmente queremos que salga al 90% de sales. Todo esto garantizando que la corriente CONDENSE, STEAMP y SATWATER permanezcan en equilibrio a 170°C como líquido saturado. Para esto se recurre además del bloque especificaciones de diseño al análisis de sensibilidad. Este último nos confirma que la especificación de temperatura solicitada se encuentra dentro del rango de la variable manipulada.

Análisis de sensibilidad

a) Vary: Calor del boiler

Define: Temperatura corriente condensado



Row/Case	Status	VARY 1 BOILER PARAM: DUTY GCAL/HR	TEMPCOND [°C]
1	OK	2.3	4.92879
2	OK	2.4	35.6498
3	OK	2.5	63.6821
4	OK	2.6	89.2635
5	OK	2.7	112.641
6	OK	2.8	134.024
7	OK	2.9	153.601
8	OK	3	170.481
9	OK	3.1	170.481
10	OK	3.2	170.481
11	OK	3.3	170.481
12	OK	3.4	170.481
13	OK	3.5	170.481
14	OK	3.6	170.481
15	OK	3.7	170.481
16	OK	3.8	170.481
17	OK	3.9	170.481
18	OK	4	170.481
19	OK	4.1	170.481
20	OK	4.2	170.481
21	OK	4.3	170.481
22	OK	4.4	170.481
23	OK	4.5	170.481
24	OK	4.6	170.481
25	OK	4.7	170.481
26	OK	4.8	170.481
27	OK	4.9	170.481
28	OK	5	170.481

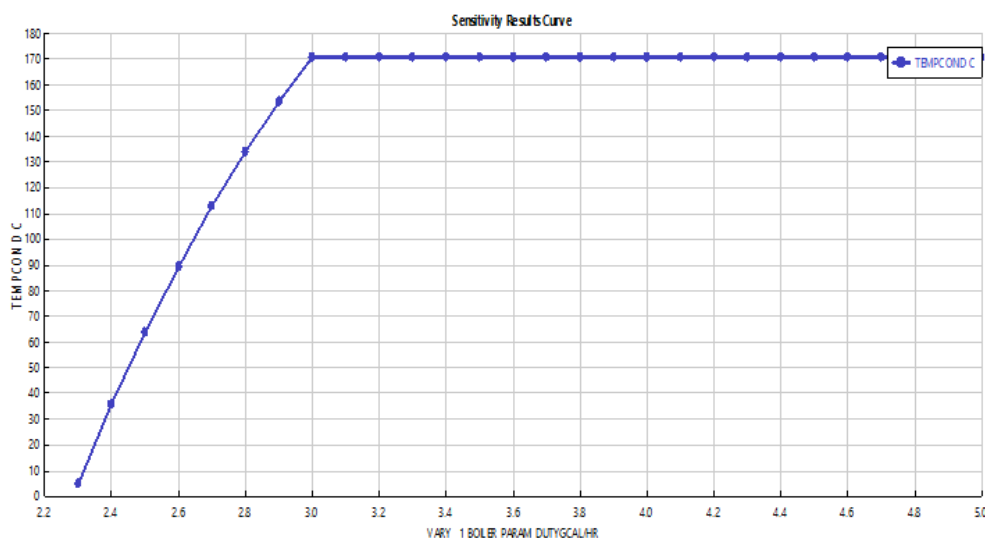


Figura 38. Resultados del análisis de sensibilidad

Este caso es solo para ver la repercusión que tiene el calor del boiler en la temperatura de la corriente condensados para que esta permanezca en equilibrio con la corriente SATWATER y STEAMP como líquido saturado.

b) Vary: Flujo de alimentación

Define: temperatura de corriente condensados

Row/Case	Status	VARY 1 FEED MIXED H2O MASSFLOW KG/HR	TEMPCOND [°C]
1	OK	4500	167.924
2	OK	4525	167.704
3	OK	4550	167.483
4	OK	4575	167.262
5	OK	4600	167.041
6	OK	4625	166.819
7	OK	4650	166.597
8	OK	4675	166.375
9	OK	4700	166.153
10	OK	4725	165.93
11	OK	4750	165.707
12	OK	4775	165.484
13	OK	4800	165.261
14	OK	4825	165.037
15	OK	4850	164.813
16	OK	4875	164.589
17	OK	4900	164.365
18	OK	4925	164.14

19	OK	4950	163.915
20	OK	4975	163.69
21	OK	5000	163.465
22	OK	5025	163.239
23	OK	5050	163.013
24	OK	5075	162.787
25	OK	5100	162.561
26	OK	5125	162.334
27	OK	5150	162.108
28	OK	5175	161.881
29	OK	5200	161.653
30	OK	5225	161.426
31	OK	5250	161.198
32	OK	5275	160.97
33	OK	5300	160.741
34	OK	5325	160.513
35	OK	5350	160.284
36	OK	5375	160.055
37	OK	5400	159.826
38	OK	5425	159.596
39	OK	5450	159.366
40	OK	5475	159.136
41	OK	5500	158.906

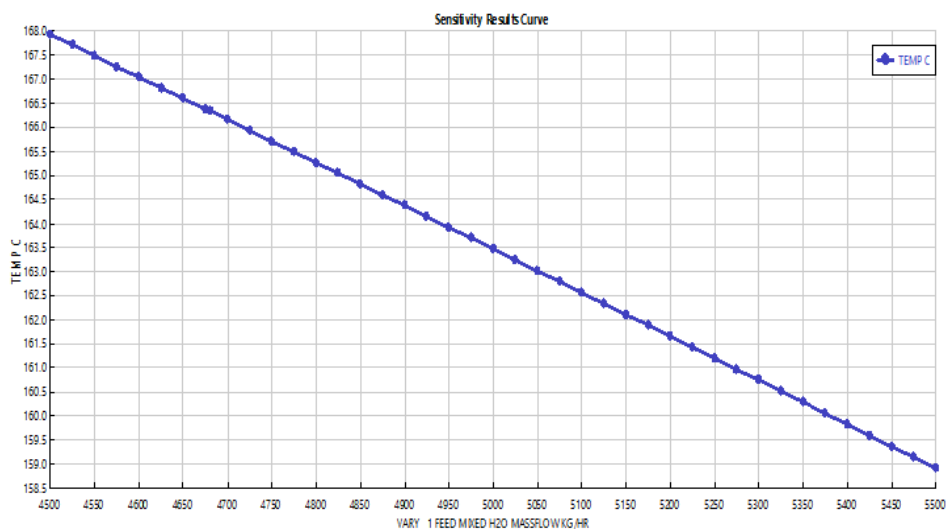


Figura 39. Análisis de sensibilidad respecto a la temperatura de los condensados

El caso b es similar al caso a pero ahora variando el flujo de alimentación en vez del calor del proceso.



c) Vary: Flujo de alimentación

Define: Flujo másico de la sal Carbonato de calcio [kg/h]

Row/Case	Status	VARY 1 FEED MIXED TOTAL MASSFLOW [KG/HR]	SATPURGA [Kg/hr]
1	OK	4500	0.0403943
2	OK	4525	0.0406178
3	OK	4550	0.0408422
4	OK	4575	0.0410666
5	OK	4600	0.0412909
6	OK	4625	0.0415153
7	OK	4650	0.0417397
8	OK	4675	0.0419641
9	OK	4700	0.0421885
10	OK	4725	0.0424129
11	OK	4750	0.0426373
12	OK	4775	0.0428617
13	OK	4800	0.0430861
14	OK	4825	0.0433104
15	OK	4850	0.0435348
16	OK	4875	0.0437592
17	OK	4900	0.0439836
18	OK	4925	0.044208
19	OK	4950	0.0444324
20	OK	4975	0.0446568
21	OK	5000	0.0448812
22	OK	5025	0.0451056
23	OK	5050	0.0453299
24	OK	5075	0.0455543
25	OK	5100	0.0457787
26	OK	5125	0.0460031
27	OK	5150	0.0462275
28	OK	5175	0.0464519
29	OK	5200	0.0466763
30	OK	5225	0.0469007
31	OK	5250	0.047125
32	OK	5275	0.0473494
33	OK	5300	0.0475738
34	OK	5325	0.0477982
35	OK	5350	0.0480226
36	OK	5375	0.048247

37	OK	5400	0.0484714
38	OK	5425	0.0486958
39	OK	5450	0.0489202
40	OK	5475	0.0491445
41	OK	5500	0.0493689

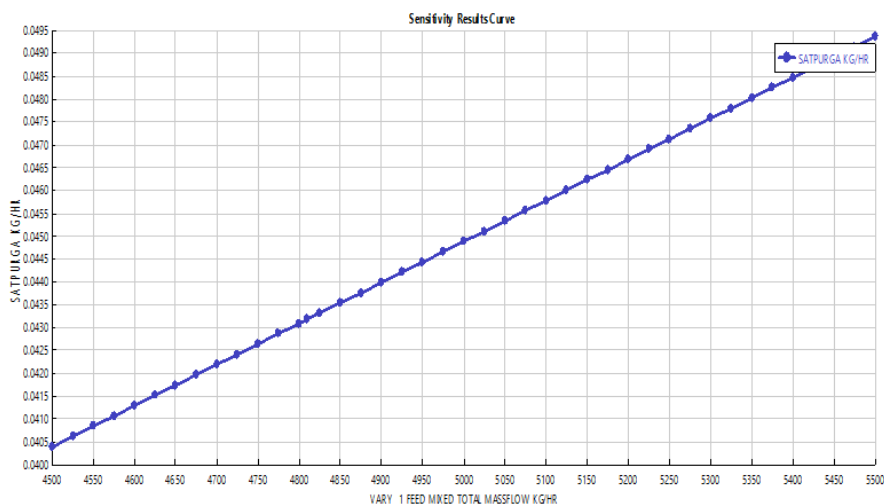


Figura 40. Analisis de sensibilidad variando el flujo de alimentación

Este último caso es para comprobar y observar la variación del flujo másico de la sal carbonato de calcio el cual como es de esperarse aumenta conforme aumenta el flujo de alimentación.

Anexo 5

A continuación se presentan los codigos utilizados en este proyecto, códigos en matlab y Visual basic para los algoritmos usados.

a) Códigos en Matlab

• Programa Principal

```
function [F]=BLuno(Sol_1)
AHE1=Sol_1(1,1);
%filename = 'testdata.xlsx';
excelObject=actxserver('Excel.Application');
excelObject.Workbooks.Open('C:\Users\Dulce Vazquez\Desktop\Pruebas
Matlab\ESuno.xlsm');
hworkbook=excelObject.workbooks;
F=excelObject.Run('genetico',AHE1);
hworkbook.Close;
excelObject.Quit;
F
AHE1
```

• Estrategias Evolutivas

```
clear all
close all

%Estrategias Evolutivas
tic
rng(4311539);
corridas=input('Ingrese el número de ejecuciones a realizar: ');

Limites=[20.0,1.1];
crit_rep=0.01;
iter=3;
best_area=[];
best_ej=[];
for g=1:corridas;
    best_ej(g) = 1.0E+20;
    contmutacion=0;
    e=0.1;
    AHE1=rand*(Limites(1,1)-Limites(1,2))+Limites(1,2);
    Sol_inicial=[AHE1];
    e_sol=feval('BLuno',Sol_inicial);
    for iteracion=1:150%de 1 hasta el número de generaciones
        N_sol=Sol_inicial;
        for o=1:1;%de 1 hasta el número de
variables%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%3
            N_sol(o)=N_sol(o)+(normrnd(0.0,e));
        end
        %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%Caso 1: Reparando AHE1
        if N_sol(1)>Limites(1,1);
            disp(sprintf('Rep1'));
            %
            y=rand;
            if y>crit_rep;
                %
                disp(sprintf('Rep1a'));
                N_sol(1)=rand()*(Limites(1,1)-
Limites(1,2))+Limites(1,2);
            else
                %
                disp(sprintf('Rep1b'));
                N_sol(1)=Limites(1,1);
            end
        elseif N_sol(1)<Limites(1,2);
            y=rand;
            if y>crit_rep;
                %
                disp(sprintf('Rep2a'));
                N_sol(1)=rand()*(Limites(1,1)-
Limites(1,2))+Limites(1,2);
            else
                %
                disp(sprintf('Rep2b'));
                N_sol(1)=Limites(1,2);
            end
        end
    end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
    e_nueva=feval('BLuno',N_sol);
```

```

        if e_nueva<=e_sol%%%%%%%%%%%%minimizando
            e_sol=e_nueva;
            Sol_inicial=N_sol;%%%%%%%%%%%%
            contmutacion=contmutacion+1;
            if e_nueva<=best_ej(g)
                best_ej(g)=e_nueva;
                best_area(g)=N_sol;
            end
        end
        b=mod(iteracion,iter);
        if b==0
            pormutacion=contmutacion/iter;
            contmutacion=0;
            if pormutacion<0.2;
                e=e*0.82;
            elseif pormutacion>0.2;
                e=e*1.18;
            end
        end
        hold on
        %
        e
        plot(iteracion,e_sol,'-.*b')
        title('Evolutionary Strategies - One
HE')%title('Algoritmo','Color','g')
        xlabel('Generations Number')
        ylabel('Total cost (E/year)')%función objetivo
    end
    best_ej(g)=e_sol;
    %
    e_sol
end
best_ej
best_area
mejor=min(best_ej);
peor=max(best_ej)
desest=std(best_ej)
prom=mean(best_ej)
mediana=median(best_ej);
disp(sprintf('El menor costo (E/año) es:',mejor));
disp(mejor);
toc

```

• Evolución Diferencial

```

clear all
close all
% clc;
%Evolución diferencial
corridas=input('Ingrese el número de ejecuciones a realizar: ');
generaciones=input('Ingrese el número de generaciones: ');
pob=input('Tamaño de la población (Debe de ser mayor a 3): '); % pob=10;
cru=input('De la tasa de cruza en escala de 0 a 1: ');
% efe=input('Asigne un valor al factor F en escala de 0 a 2: ');
tic
rng(4311539);
Limites=[12.0,1.1];
crit_rep=0.010;

```

```

n=1;%%%%%numero de variables
X=[];
v=[];
aptitud=[];
best_area=[];
best_ej=[];
%Generación de Población inicial
for t=1:corridas
    best_ej(t) = 1.0E+15;
for i=1:pob
    AHE1=rand*(Limites(1,1)-Limites(1,2))+Limites(1,2);
    X(i,1)=AHE1;%X: nueva solución
%       X(i,2)=AHE2;
    sol=X(i,:);
    aptitud(i) = fitnes(sol);
end
% Ciclo Generacional
for z=1:generaciones %iteraciones
%   for z=1:30;
        for i=1:pob
            r1=ceil(rand*(pob));
            while r1==i;
                r1=ceil(rand*(pob));
            end
            for j=1:n
                sob1=X(r1,j); %sob1(j)=X... nos indica la posición de esta
solución
%                 sob2=X(r2,j);
%                 sob3=X(r3,j);
%                 v(j)=sob1+(efe*(sob2-sob3));
                v(j)=sob1;
            end
% %%%%%%%%%%%%%%Caso 1: Reparando AHE1
            if v(1)>Limites(1,1);
%                 fprintf('Rep1');
                y=rand;
                if y>crit_rep;
                    v(1)=rand*(Limites(1,1)-Limites(1,2))+Limites(1,2);
                else
                    v(1)=Limites(1,1);
                end
            elseif v(1)<Limites(1,2);
                y=rand;
                if y>crit_rep;
                    v(1)=rand*(Limites(1,1)-Limites(1,2))+Limites(1,2);
                else
                    v(1)=Limites(1,2);
                end
            end
% %%%%%%%%%%%%%%
%cruza;
        j0=ceil(rand*(n));
%       cru = 0.5 + 0.4 * rand;%%para ingresar este valor manualmente
        for j=1:n
            d=rand;
            if ((d<=cru) | j==j0)
                u(j)=v(j);
            end
        end
    end
end

```

```

        else
            u(j)=X(i,j);
        end
    end
end
%Fitness de u(1,j)
fonew = fitnes(u);
if fonew<=aptitud(i)%%%minimización
    for j=1:n
        X(i,j)=u(j);
    end
    aptitud(i)=fonew;
    if fonew <= best_ej(t)%%%%%%%%%%%%%%
        best_ej(t)=fonew;
%         best_area(t)=fitnes(u);%%fitness=Not enough input
arguments
    end
end
end
    hold on
    bestit=max(aptitud);
    avgit=mean(aptitud);
    s(1) = subplot(2,1,1);
    plot(z,bestit, '-.*b');
%     axis ([0 300 0 inf]);
    title(s(1), 'Differential Evolution ');
    xlabel('Generation Number');
    ylabel('Total Cost (E/yr)');
    hold off
    hold on
    %segundo gráfico
    s(2) = subplot(2,1,2);
    title(s(2), 'Cost with base in the mean ');
    plot(z,avgit, '-.*b');
    xlabel('Generation Number');
    ylabel('Mean');
    hold off
end
best_ej(t)=fonew;
end
mejor=min(best_ej)
peor=max(best_ej)
desest=std(best_ej)
prom=mean(best_ej)
mediana=median(best_ej)
toc
fprintf('El mejor de la última generación es: %f',mejor);

```

- **Función Fitness (para un intercambiador de calor)**

```

function s=fitnes(sol)
AHE1=sol(1);

Sol_inicial=[AHE1];
%fo=feval('BL', Sol_inicial);
fo=feval('BLuno', Sol_inicial);
%peor=min(fo);

```



```
%a=peor-fo;  
s=fo;  
end
```

b) Código en VBA

```
Public Function genetico(areaeco As Double) As Variant  
Set Asp = GetObject("C:\Users\Dulce Vazquez\Desktop\pp32.bkp")  
Asp.Visible = True  
Asp.SuppressDialogs = True  
Application.DisplayAlerts = False  
  
'Un intercambiador  
Asp.Tree.FindNode("\Data\Blocks\HE1\Input\AREA").Value = areaeco  
Asp.Engine.Run  
  
Dim a(1 To 14) As Double  
a(1) = Asp.Tree.FindNode("\Data\Blocks\HE1\Output\HX_AREAP").Value  
a(2) = Asp.Tree.FindNode("\Data\Blocks\PHEATER\Output\QCALC").Value  
a(3) = Asp.Tree.FindNode("\Data\Blocks\BOILER\Output\QCALC").Value  
  
'COSTO DE OPERACIÓN  
'H= 6000 horas /año 'costo de gas 0.0509 euros/kWh  
operacion = ((a(2) * 1162.9) * 0.0509) * 6000  
'costo aspen  
opboiler = (a(3) * 45.11) * 0.85 * 6000  
ototal = operacion + opboiler  
  
'COSTO DE INVERSIÓN - Segun libro Introducción a la ingeniería de procesos pp 199-210  
a(4) = 10000 + (88 * (a(1) ^ 1))  
a(5) = a(4) * 3.74 ' costo total dentro de los limites de bateria  
  
'Costos fijos totales-Costos Fuera de límites de Batería (30% de costos dentro de límites de batería)  
a(6) = a(5) * 0.3  
'Costos de Diseño e Ingeniería (30% de la suma de los costos dentro y fuera de límites de batería):  
a(7) = (a(5) + a(6)) * 0.3  
'Contingencias (10% de la suma de los costos dentro y fuera de límites de batería)  
a(8) = (a(5) + a(6)) * 0.1  
'Costo de inversión Total  
a(9) = (a(5) + a(6) + a(7) + a(8)) * 0.85 '*convertir a euros multiplicando por 0.85  
  
'COSTO DE INVERSIÓN AMORTIZADO este será el de inversión  
a(10) = 0.1 'annual discount rate (i) = 10%  
a(11) = (1 / (1 + a(10)) ^ 1) + (1 / (1 + a(10)) ^ 2) + (1 / (1 + a(10)) ^ 3)  
a(12) = (1 / (1 + a(10)) ^ 4) + (1 / (1 + a(10)) ^ 5) + (1 / (1 + a(10)) ^ 6)  
a(13) = (1 / (1 + a(10)) ^ 7) + (1 / (1 + a(10)) ^ 8) + (1 / (1 + a(10)) ^ 9) + (1 / (1 + a(10)) ^ 10)  
a(14) = a(11) + a(12) + a(13)  
cia = a(9) / a(14)  
genetico = ototal + cia  
End Function
```

1. Bibliografía

1. XII JORNADAS DE INVESTIGACIÓN Revista Investigación Científica, Vol. 4, No. 2, Nueva época. Mayo - Agosto 2008, La simulación de procesos en ingeniería química.
2. A. Alva-Argbez, A.C. Kokossis and R. Smith Wastewater minimization of industrial systems using an integrated approach Department of Process Integration, UMIST, U.K, Computers chcm. Engng Vol. 22, Suppl.. pp. S741-S744, 1998 8 1998 Elsevier Science Ltd. All rights reserved Printed in Great Britain.
3. A. E. Eiben and and J.E. Smith, Introduction to evolutionary computing, (2007) pp 101 y 102, 111 2nd edición, Springer, Natural Computing Series.
4. A. Suppaitnarm, K. A. Seffen, G. T. Parks, P. J. Clarkson. (Apr 2007). A Simulated Annealing Algorithm for Multiobjective Optimization. Engineering Optimization, 33:1, 59-85.
5. Abdullah Alqahtani, Integrated approach to chemical process flowsheet synthesis, A Doctoral Thesis. Loughborough University. June 2008. Pp32-33.
6. Adrian Verhoef, Jan Degrève, Bart Huybrechs, Henk van Veen, Paul Pex, Bart Van der Bruggen, Simulation of a hybrid pervaporation–distillation process, Computers and Chemical Engineering 32 (2008) 1135–1146.
7. Ai-Hong Li, Xiao-Yan Fan, Jiří Jaromír Klemes, Zhi-Yong Liu, Concentration potential concepts: Powerful tools for design of waterusing networks with multiple contaminants, Journal of Cleaner Production 165 (2017) 254 – 261.
8. A. Mateos Andaluz, Universidad carlos iii de Madrid, Inteligencia en Redes de Comunicaciones, Ingeniería de Telecomunicación, Algoritmos Evolutivos y Algoritmos Genéticos.
9. ASIMPTOTE, P.O. The Netherlands, (s.f) Cycle Tempo, 04 de Diciembre 2016, de <http://www.asimptote.nl/software/cycle-tempo>.
10. Aspen Plus. (2001), *Aspen Plus user manual & guide*, version 11.1, Design, Simulation and Optimization Systems Aspen Technology, Cambridge, 04 de Diciembre 2016, de <http://www.aspentech.com/>.
11. Ataei, A. y Yoo, C. K., Simultaneous Energy and Water Optimization in Multiple-Contaminant Systems with Flowrate Changes Consideration, Int. J. Environ. Res., 4(1):11-26, 2010.
12. Bernd Gross and Peter Roosen, *Computers them*. Elsevier Science Ltd., Total Process Optimization in Chemical Engineering with Evolutionary Algorithms. Chair of Technical Thermodynamics. *Engng* Vol. 22, Suppl., pp. S229-S236, 1998.
13. Carl L. Hamann Jr., P.E. J. Brock Mc. Ewen, P.E. Anthony G. Meyers, P.E., "Guide to Selection of Water Treatment Processes", Lee H. Odell, PE CH2M HILL., 1997.
14. CC. Chen, LB Evans - AIChE Journal, 1986, Wiley Online Library, A local composition model for the excess Gibbs energy of aqueous electrolyte systems.

15. CHEMSTATIONS EUROPE GMBH, 2016, CHEMCAD, 04 de Diciembre 2016, de <http://www.chemstations.eu/es/productos/cc-steady-state/>.
16. Ching-Huei Huang, Chuei-Tin Chang, Han-Chern Ling and Cheng-Chang Chang, Process Design and Control, A Mathematical Programming Model for Water Usage and Treatment Network Design, *Ind. Eng. Chem. Res.* 1999, 38, 2666-2679.
17. Detchasit Prakotpol, Thongchai Srinophakun, GA Pinch: genetic algorithm tool box for water pinch technology, *Chemical Engineering and Processing* 43 (2004) 203–217.
18. Doyle and smith, Targeting water reuse with multiple contaminants.
19. El intercambio iónico y principios básicos, http://dardel.info/IX/IX_Intro_ES.html, Dow Chemical Company. Actualización 6 de Noviembre 2016.
20. Elvis Ahmetović, et al., General superstructure and global optimization for the design of integrated process water networks, Pittsburgh, PA 15213, United States.
21. Eusiel Rubio-Castro, et al., Synthesis of cooling water systems with multiple cooling towers, *Thermal Engineering*, 2008. 13: p. 977-985.
22. Evolución Diferencial, Última modificación 9 de Octubre 2017 a las 9:59, https://es.wikipedia.org/wiki/Evoluci%C3%B3n_diferencial puedo cambiarla a algun libro de optimización.
23. Gade Pandu Rangaiah, Chemical process retrofitting and revamping: Techniques and applications, Wiley, pp 112-122, 11 MAR 2016.
24. Guillermo Choque Aspiazu, Elitismo en algoritmos genéticos, <http://menteerrabunda.blogspot.mx/2010/05/elitismo-en-algoritmos-geneticos.html>, Marzo 15 de 2010, 9:36.
25. H. I. Britt &, The Estimation of Parameters in Nonlinear, Implicit Models, Pages 233-247 | Published online: 09 Apr 2012.
26. HM Voigt, W Ebeling, I Rechenberg, Parallel Problem Solving from Nature–PPSN IV, volume 1141 of Lecture Notes in Computer Science, Berlin (Germany), 22.-26. September 1996, Berlin.
27. Ibrahim H. Osman and Gilbert Laporte. Metaheuristics: A bibliography. *Annals of Operations Research*, 63:513–628, 1996.
28. James R. Welty, Charles E. Wicks, Robert E. Wilson, Gregory L. Rorrer, Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer, 5th Edition, Printed in the United States of America 2008, Pp 329, 334, 336-340, 343.
29. Jiri J Klemes, Handbook of Process Integration (PI): Minimisation of Energy and Water Use, Waste and Emissions, pp 46-48, Woodhead publishing, 31 jul 2013 https://books.google.com.mx/books?id=EuFwAgAAQBAJ&printsec=frontcover&hl=es&source=gbs_ge_summary_r&cad=0#v=onepage&q&f=false.
30. José Andrés Sosa Daza, Estrategias de Simulación (Secuencial, Simultánea e Híbrida), 27 de Abril de 2015, <https://prezi.com/tt6qrasnjktv/estrategias-de-simulacion-secuencial-simultanea-e-hibrida/>.

31. K. Price and R. Storn. Sitio web de la Evolución diferencial, International Computer Science Institute, <http://www.icsi.berkeley.edu/storn/code.html>, 2004.
32. Kalyanmoy Deb. (2002). Multi-Objective Optimization using evolutionary Algorithms: An Introduction. Chichester: Wiley, pp 7-8, 2011.
33. Lucero de Jesús Molina Jiménez, Simulación del proceso de producción de queso mysost de lactosuero mediante aspen plus, Universidad veracruzana, Facultad de ciencias químicas, Xalapa, Veracruz, 2014.
34. M.A.S.S. Ravagnani, A.P. Silva, P.A. Arroyo, A.A. Constantino, Heat exchanger network synthesis and optimisation using genetic algorithm, Chemical Engineering Department, Thermal Engineering 25 (2005) 1003–1017.
35. Marco Dorigo and Thomas Stützle, Ant Colony Optimization. MIT Press, 2004.
36. Maria da Conceicao Cunha, Luisa Ribeiro. (2004). Tabu search algorithms for water network optimization. European Journal of Operational Research, 157, 746–758.
37. Miloš Bogataj, Miguel J. Bagajewicz, Design of non-isothermal Process Water Networks, 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE17, V. Plesu and P.S. Agachi (Editors), 2007 Elsevier B.V./Ltd.
38. M. Ebrahim, Al- Kawari, Pinch technology: an efficient tool for chemical- plant energy and capital-cost saving, Applied Energy 65 (2000) 45±49.
39. M. Higa, A.J. Freitas a, A.C. Bannwart b, R.J. Zemp, Thermal integration of multiple effect evaporator in sugar plant, Applied Thermal Engineering 29 (2009) 515–522.
40. M. Taal, I. Bulatov, J. Klemes, P. Stehlik, Cost estimation and energy price forecast for economic evaluation of retrofit projects. Applied Thermal Engineering, 23 (2003) 1819e1835.
41. Nikolaus Hansen, Sibylle D.Müller, Petros Koumoutsakos, Reducing the Time Complexity of the Derandomized Evolution Strategy with Covariance Matrix Adaptation (CMA-ES).
42. NORMA Oficial Mexicana NOM004ENER2008, Eficiencia energética de bombas y conjunto motorbomba, para bombeo de agua limpia, en potencias de 0,187 kW a 0,746 kW. Límites, métodos de prueba y etiquetado. 17/11/2015.
43. NORMA Oficial Mexicana NOM-011SESH2012, 17/11/2015, Calentadores de agua de uso doméstico y comercial que utilizan como combustible Gas L.P. o Gas Natural. Requisitos de seguridad, especificaciones, métodos de prueba, marcado e información comercial (cancela a la NOM020SEDG2003).
44. NORMA Oficial Mexicana NOM014-CONAGUA2003, Requisitos para la recarga artificial de acuíferos con agua residual tratada.
45. NORMA Oficial Mexicana NOM-127-SSA1-1994, Salud ambiental, agua para uso y consumo humano-Límites permisibles de calidad y tratamientos a que debe someterse el agua para su potabilización.

46. O. A. Jaramillo, INTERCAMBIADORES DE CALOR, Centro de Investigación en Energía. Universidad Nacional Autónoma de México, November 20, 2007, pp 1-33.
47. Pinch Technology: Basics for the beginners: Introduction, The chemical engineers resource page, www.cheresources.com.
48. ProSim, 2002-2014, ProSim Software, Diseño: Bloom Multimedia, 04 de Diciembre 2016, de <http://www.prosim.net/fr/logiciels-prosimplus--simulation-optimisation-des-procedes-industriels-continus-1.php>.
49. R. F Dunn and Mahmoud M. El-Halwagi, Review Process integration technology review: background and applications in the chemical process industry, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology J Chem Technol Biotechnol* 78:1011–1021 (2003).
50. R. Smith, Optimization Application: Pinch Technology Analysis, CHAPTER 9 Optimum Design and Design Strategy, Chemical Process Design, McGraw-Hill, New York, 1995.
51. R. P. Soares and A. R. Secchi, EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimisation, *Computer Aided Chemical Engineering*, 14, (2003), 947-952.
52. R. Selbas, O. Kizilkan, M. Reppich, A new design approach for shell-and-tube heat exchangers using genetic algorithms from economic point of view. *Chemical Engineering and Processing* 45 (2006) pp. 268-275.
53. Rainer Storn, Kenneth Price. (1997). Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces. *Journal of Global Optimization*, 11, 341–359.
54. Ricardo E. PAUER, Lo que ocurre en el interior de la caldera (y en el resto del sistema de vapor), IDRECO SUDAMERICANA SA, Seminario sobre intercambio iónico, Agua y Energía, Rosario, Septiembre 1990, pp 2-13.
55. Rodolfo Murrieta-Dueñas, Juan Gabriel Segovia-Hernández, Arturo Hernández-Aguirre, Jazmín Cortez-González, Roberto Gutiérrez-Guerra, Memorias del XXXVI Encuentro Nacional de la AMIDIQ, Optimización de los parámetros de operación de la planta de alquilación HFU implementado el algoritmo BUMDA.
56. Tahoe Design Software, 2015, Hidroflow Software, 04 de Diciembre 2016, de <http://www.tahoesoft.com/html/hydroflo.htm>.
57. V.K. Patel, R.V. Rao, Design optimization of shell-and-tube heat exchanger using particle swarm optimization technique, *Applied Thermal Engineering* 30 (2010) 1417e1425.
58. Vijay Arya, Naveen Garg, Rohit Khandekar, Adam Meyerson, Kamesh Munagala, y Vinayaka Pandit. (2004). Local search heuristics for k-median and facility location Problems. *siam j. comput.*, Vol. 33, No. 3, 544–562.
59. Yenier Omar Vicente Morales, Universidad Central “Marta Abreu” de las Villas Departamento de Ingeniería Química, Título: Aplicación del Aspen Plus en el análisis de la Integración energética en la papelería Damují, 2008, pp 3-6.